

РЕГУЛЯРИЗАЦИЯ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ ВОССТАНОВЛЕНИЯ НАЧАЛЬНОГО УСЛОВИЯ ДЛЯ НЕЛИНЕЙНОЙ ДИФФУЗИОННО-ЛОГИСТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ¹

©2025 Т. А. Звонарева*, О. И. Криворотько

*630090 Новосибирск, пр-кт. Акад. Коптюга, 4, Институт математики им. С.Л.
Соболева СО РАН, Россия
e-mail: * t.zvonareva@g.nsu.ru*

Поступила в редакцию --.2024 г.
Переработанный вариант --.2025 г.
Принята к публикации --.2025 г.

Задача восстановления начального условия в начально-краевой задаче для нелинейного уравнения типа диффузии—реакции по зашумленным данным интегрального типа в фиксированные моменты времени является некорректной (обратная задача). В работе решение обратной задачи сведено к решению задачи минимизации функционала А. Н. Тихонова, в котором параметр регуляризации определяется несколькими способами. Приведен численный анализ регуляризованных решений обратной задачи для линейной и нелинейной постановки, показана эффективность регуляризации численного решения при фиксированном уровне шума в данных.

Ключевые слова: задача об источнике, обратная задача, модель «реакции—диффузии», регуляризация, градиентные методы.

ВВЕДЕНИЕ

В работе рассматривается уравнение типа адвекции—диффузии—реакции

$$\frac{\partial u(\mathbf{x}, t)}{\partial t} + (\mathbf{v}(\mathbf{x}, t) \cdot \nabla)u(\mathbf{x}, t) - \nabla(D(\mathbf{x})\nabla u(\mathbf{x}, t)) = g(\mathbf{x}, t, u), \quad (1)$$

где $\mathbf{x} \in \Omega \subset \mathbb{R}^n$, $t \in [0, +\infty]$, $u(\mathbf{x}, t) \in C^{2,1}(\Omega \times (0, +\infty))$ — плотность диффундирующего вещества, $\mathbf{v}(\mathbf{x}, t) \in C^{2,1}(\Omega \times (0, +\infty))$ — поле скорости, с которой движется данное вещество, $D(\mathbf{x}) \in C^1(\Omega)$ — коэффициент диффузии, $g(\mathbf{x}, t, u) \in C^0(\Omega \times (0, +\infty))$ — функция источников вещества. В общем случае все

¹Постановки прямой и обратной задач, а также алгоритмы их решения (разделы 1 и 2) сформулированы в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования РФ (тема «Аналитическое и численное исследование обратных задач об определении параметров источников атмосферного или водного загрязнения и (или) параметров среды», проект FENG-2023-0004). Численные эксперименты (раздел 3) выполнены при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 23-71-10068).

эти величины — вектор-функции. Отдельной важной задачей является точное задание функциональных пространств для рассмотрения существования и единственности решения подобной системы. Например, в работе [1] было введено понятие ренормализованного решения для доказательства теоремы существования решения $u(\mathbf{x}, t) \in L^\infty(\Omega \times [0, +\infty])$ задачи (1) при условиях $\mathbf{v} \in L^\infty(\Omega \times [0, +\infty])$, $D \in L^\infty(\Omega)$, локальной Липшицевости $g : \mathbb{R}_0^+ \rightarrow \mathbb{R}$, неоднородными граничными условиями смешанного типа и начальном условии $u(\mathbf{x}, 0) = \varphi(\mathbf{x}) \in L^1(\Omega)$.

Модель (1) может описывать процессы

- тепломассопереноса [2], где $u(\mathbf{x}, t) = (v, T)$ — вектор, характеризующий поле скорости и температуру, $\Omega \subset \mathbb{R}^3$, $g(u) = (GrT\gamma + Ha^2 f_0, Qj_0^2/Pr)$, f_0 — средние части электромагнитной силы, j_0^2 — распределения источников тепла, Gr , Pr , Ha — числа Грасгофа, Прандтля и Гартмана соответственно, Q — параметр тепловыделения, задающий интенсивность источников тепла, γ — единичный вектор, направленный вдоль оси z . Авторами предложена математическая модель, описывающая движение металлического расплава в переменном неоднородном магнитном поле короткого соленоида, и показана возможность расщепления полной магнитогидродинамической задачи на две подзадачи: о диффузии магнитного поля и тепломассопереносе;
- загрязнения окружающей среды [3, 4], где $u(\mathbf{x}, t) = (u_1, u_2, \dots, u_s)$ — концентрация рассматриваемых веществ, $\Omega \subset \mathbb{R}$, $g = \sum_{i=1}^m N_i(t)\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) + \tilde{g}(\mathbf{x}, t)$, $N_i(t)$ — интенсивность точечных источников с координатами \mathbf{x}_i , $\tilde{g}(\mathbf{x}, t)$ — априорно известная функция. Авторы работы [3] предложили явную асимптотическую формулу для определения местоположения источника и обосновали с её помощью численный алгоритм определения интенсивности источников $N_i(t)$;
- динамики популяции [5], где $u(\mathbf{x}, t)$ — концентрация особей, $\Omega \subset \mathbb{R}^2$, $\mathbf{v} = 0$, $g(u) = (1 - u)u$. В статье приведены и доказаны некоторые свойства модели в применении к биологическим проблемам;
- распространения информации в онлайн социальных сетях [6, 7], где $u(\mathbf{x}, t)$ — плотность пользователей, вовлеченных в процесс распространения информации, $\Omega \subset \mathbb{R}$, $\mathbf{v} = 0$, $g(u) = (1 - u/K)r(t)u$, K — пропускная способность сети, $r(t)$ — скорость роста числа активных пользователей. Авторы [6] предложили модель на основе уравнения в частных производных для описания распространения информации в онлайн социальных сетях и с помощью реальных данных показали, что такая модель описывает процесс с точностью более 90%. А в работе [7] численно исследовалась задача определения начальной функции плотности $\varphi(\mathbf{x})$ той же модели по дополнительным данным о плотности в различных точках пространства и в различные моменты времени. Для решения поставленной задачи применялся стохастический метод минимизации целевого функционала, основанный на структуре модели, и подход машинного обучения, который не использует математическую модель при обучении. Показано,

что первый подход позволяет получить высокую точность восстановления $\varphi(\mathbf{x})$ (около 99%), а реконструкция начальной плотности с помощью искусственных нейронных сетей при решении прямой задачи дает среднеквадратичную точность в норме L_2 в 10^3 раз хуже, чем классический метод;

- взаимодействия групп людей [8], где $u(\mathbf{x}, t) = (u^1, u^2)$ — плотность групп 1 и 2, $\Omega \subset \mathbb{R}^2$, $\mathbf{v} = (v^1, v^2)$ — функция управления или стратегии групп 1 и 2, $g(u) = (0, 0, g^1(u), g^2(u))$, $g^i(u) = \int_{\Omega} (u^i)^2 + \lambda u^1 u^2$, λ — неотрицательная вещественная константа. Автор исследовал динамику популяций с помощью модели среднего поля, предложил численный метод определения управления, основанный на методе градиентного спуска, и провел несколько численных экспериментов;
- оптимального управления [9], где $u(\mathbf{x}, t)$ — переменная состояния, $\Omega \subset \mathbb{R}^n$, $\mathbf{v} = 0$, $g(u) = g(\mathbf{x}, t, u, \nabla u) + u_{control}$, $u_{control}$ — управление. Авторы разработали теорию существования и единственности решения для нелинейных модельных задач, в которых функции управления входят линейно.

Для таких процессов возникают обратные задачи определения параметров \mathbf{v} и D , функции g и начального условия φ по дополнительной информации вида

$$f(\mathbf{x}, t) = u(\mathbf{x}, t), \quad \mathbf{x} \in \Omega, t \in [0, T] \quad (2)$$

или интегральным данным

$$f(t) = \int_{\Omega} u(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x}, \quad t \in [0, T]. \quad (3)$$

Например, при описании процессов загрязнения окружающей среды авторы статьи [3] исследуют задачу определения функций $u(\mathbf{x}, t)$, $N_i(t)$ и координат \mathbf{x}_i , $\Omega \subset \mathbb{R}$, по заданным функциям начальных и граничных условий, а также условиям перепредопределения $u(\mathbf{y}_i, t)$. В работе [4] исследуется задача восстановления функции источника загрязнения воздуха $g(t)$ для системы обыкновенных дифференциальных уравнений в форме продукции-деструкции по данным о концентрации вещества $u(t)$ в различные моменты времени.

Такие обратные задачи зачастую являются некорректными [10], то есть их решение может быть неединственным и/или неустойчивым (например, в пространстве гладких функций).

Для построения решения обратной задачи для модели (1) была применена регуляризация [11]. В приведенных выше примерах восстановления источников загрязнения окружающей среды авторы статьи [3] применяли регуляризацию А. Н. Тихонова, а в статье [4] использовалась итерационная регуляризация для определения функции источника.

В работе [12] исследовалась задача определения начальной функции плотности пользователей, вовлеченных в процесс распространения информации, $\varphi(x)$ по данным вида (3) и было показано, что можно устойчиво и однозначно решить некорректную задачу с помощью метода регуляризации А. Н. Тихонова.

Также за последние 5 лет появился ряд новых публикаций, в которых рассматриваются новые эффективные численные методы решения обратных задач для нелинейных диффузионных уравнений. В работах [13–16] исследуются свойства прямых и обратных задач для нелинейных уравнений с дробными производными по времени и пространству. А именно, в работе [13] приведены теоремы о существовании и единственности решения обратной задачи определения порядков дробных производных в одномерном случае по данным в середине области, а также предложен алгоритм решения поставленной задачи с применением регуляризации А. Н. Тихонова. В работах [14, 15] рассматриваются задачи определения порядков дробных производных в двумерном случае и коэффициентов в одномерном случае по данным о функциях в некоторых точках области, которые решаются метаэвристическими методами оптимизации. В работе [16] обратная коэффициентная задача для уравнения с дробной производной решается с использованием градиентного метода с применением регуляризации А. Н. Тихонова. Работы [17, 18] посвящены решению обратных задач восстановления коэффициента в уравнениях типа Бюргерса по дополнительной информации о фронте реакции, предложен способ решения поставленной задачи градиентным методом, где начальное приближение выбирается с помощью асимптотического анализа. А в работе [19] задача восстановления проницаемости нелинейного двумерного уравнения диффузии решается методом итеративной регуляризации Гаусса–Ньютона для функционала А. Н. Тихонова.

В нашей работе в обратной задаче требуется определить функцию начального условия из нелинейного диффузионно-логистического уравнения по информации интегрального типа в фиксированные моменты времени, которая может быть переформулирована в обобщенном виде: определить амплитуду импульсного источника в нелинейном диффузионно-логистическом уравнении по данным интегрального типа о процессе в фиксированный момент времени. Особенность такой постановки продиктована областью применения данной модели к описанию социальных процессов, в которых данные пространственного типа недоступны для измерения, а процесс характеризуется видом логистической части уравнения и начальным условием, идентификация которого носит определяющий характер. В более ранних работах исследовано численное решение обратной задачи об источнике по данным пространственного типа и получены условия устойчивости решения обратной задачи.

В данной работе построен алгоритм регуляризации решения обратной задачи (1), (3) в случае диффузионно-логистической модели, т. е. при следующих условиях $\Omega \in \mathbb{R}$, $v = 0$, $D = \text{const}$, $g(u) = (1 - u/K)r(t)u$, которая возникает при описании процесса распространения информации в онлайн социальных сетях [6], динамики популяций [5]. В разделе 1 приведены формулировки прямой и обратной задач для диффузионно-логистической модели. В разделе 2 сформулирован алгоритм регуляризации численного решения обратной задачи. В разделе 3 приведены численные эксперименты для синтетических данных при различном выборе параметра регуляризации.

1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

В работе рассматривается начально-краевая задача для одномерной диффузионно-логистической модели при $v = 0$, $D = \text{const}$ [6]:

$$\begin{aligned} u_t &= Du_{xx} + \left(1 - \frac{u}{K}\right) r(t)u, & l_1 \leq x \leq l_2, t \geq 1, \\ u(x, 1) &= \varphi(x), & l_1 \leq x \leq l_2, \\ u_x(l_1, t) &= u_x(l_2, t) = 0, & t \geq 1. \end{aligned} \quad (4)$$

Уравнение имеет диффузионное (первое) и логистическое (второе) слагаемые, последнее из которых описывает динамику исследуемого процесса. Здесь $u(x, t) \in C^{2,1}((l_1, l_2) \times (1, +\infty)) \cap C^{1,0}([l_1, l_2] \times [1, +\infty))$ может быть концентрацией вещества в атмосфере [3, 4], концентрацией особей [5] или плотностью пользователей, вовлеченных в процесс распространения информации [6, 7], $K > 0$ — константа, описывающая максимальное значение функции $u(x, t)$, $r(t) \in C^1([1, +\infty))$ — скорость роста функции $u(x, t)$, $\varphi(x) \in C^0([l_1, l_2])$ — начальная функция плотности (источник).

Прямая задача (4) состоит в вычислении функции плотности $u(x, t)$ при заданной начальной функции $\varphi(x)$ и имеет единственное решение. Всюду далее такую зависимость мы будем обозначать $u(x, t; \varphi)$.

Обратная задача (4), (5) состоит в определении начальной функции плотности $\varphi(x)$ по дополнительной информации интегрального типа в различные моменты времени:

$$\sum_{i=1}^{N_1} u(x_i, t_k) = f_k, \quad l_1 \leq x_i \leq l_2, t_k \geq 1, k = 1, \dots, N_2. \quad (5)$$

В работе [12] после линеаризации и дискретизации обратная задача (4), (5) была сведена к системе линейных алгебраических уравнений $A\varphi = f$. Было показано, что число обусловленности матрицы A имеет порядок 10^{16} , демонстрирующее неустойчивость решения линеаризованной обратной задачи [10].

2. АЛГОРИТМЫ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ

Положим $u(x, t) \in L^2((l_1, l_2) \times (1, +\infty))$ и поставим начальной функции плотности $\varphi(x)$ в соответствие набор параметров $q = (q_0, q_1, \dots, q_{d-1})$. То есть введем класс

$$Q_d := \left\{ q \in \mathbb{R}^d : q_j \geq 0, \varphi(x_{j+1}) = q_j, j = 0, \dots, d-1 \right\},$$

d — число параметров.

В работе [12] решение обратной задачи (4), (5) было сведено к решению задачи минимизации функционала невязки по параметрам $q \in Q_d$ в случае синтетических незашумленных данных:

$$J(q) = \gamma \sum_{k=1}^{N_2} \left| \sum_{i=1}^{N_1} u(x_i, t_k; q) - f_k \right|^2,$$

$\gamma = (T - 1)/N_2$ – нормирующий коэффициент. Задача минимизации была решена методами глобальной оптимизации роя частиц, тензорного поиска и градиентными методами. Однако итерационная регуляризация незначительно улучшила устойчивость решения обратной задачи.

Мы рассматриваем случай аддитивно зашумленных синтетических данных обратной задачи, то есть данных в виде

$$f_k^\delta = f_k + \delta \xi_k f_k,$$

где δ – уровень шума, а ξ – случайная величина, имеющая стандартное нормальное распределение.

Тогда обратную задачу (4), (5) можно свести к соответствующей задаче минимизации функционала А. Н. Тихонова [11, 20]:

$$M(q; \alpha, \delta) = \gamma \sum_{k=1}^{N_2} \left| \sum_{i=1}^{N_1} u(x_i, t_k; q) - f_k^\delta \right|^2 + \alpha \sum_{j=1}^d |q_j - q_j^0|^2 \quad (6)$$

с параметром регуляризации $\alpha \geq 0$ и некоторым приближением к точному решению q^0 (см. пункт 3.1). Решением задачи

$$q^* = \min_{q \in Q_d} M(q; \alpha, \delta) \quad (7)$$

будем считать вектор параметров $q^* \in Q_d$, минимизирующий функционал А. Н. Тихонова (6).

Отдельным сложным на практике вопросом является выбор параметра регуляризации α как функции погрешности данных $\alpha(\delta)$. Существуют различные способы выбора параметра α [21]. Рассмотрим некоторые из них:

1. Способ, основанный на принципе невязки [21]. Для известного уровня погрешности данных $\delta > 0$ параметр определяется по невязке, то есть из соотношения

$$\gamma \sum_{k=1}^{N_2} \left| \sum_{i=1}^{N_1} u(x_i, t_k; q_\alpha) - f_k^\delta \right|^2 = \delta.$$

Переходим к задаче минимизации следующего функционала:

$$\hat{M}(q, \alpha; \delta) = \left| \gamma \sum_{k=1}^{N_2} \left| \sum_{i=1}^{N_1} u(x_i, t_k; q) - f_k^\delta \right|^2 - \delta^2 \right| + \alpha \sum_{j=1}^d |q_j - q_j^0|^2.$$

2. Асимптотический способ [22] основан на следующей зависимости:

$$\alpha(\delta) = C\delta^2,$$

где $C > 0$ – некоторая константа.

3. Способ подбора параметра регуляризации [23]. Зачастую на практике значение $\delta > 0$ неизвестно, и выбор α делается на основе дополнительной информации о решении и процессе. Например, при описании редукции измерений [23] можно использовать гладкость решения в выражении параметра регуляризации, т. е. $\alpha = cT^3$, где T — характерное время, пропорциональное локальной гладкости решения.

2.1. Градиентный метод

Общая идея градиентных методов состоит в последовательном уменьшении значения целевого функционала в виде последовательности решений

$$q^{m+1} = q^m - \alpha_m \nabla M(q^m; \alpha, \delta), \quad q^0 \in Q_d,$$

где $\alpha_m > 0$ — параметр спуска, характеризующий тот или иной градиентный метод, $\nabla M(q^m; \alpha, \delta)$ — градиент целевого функционала $M(q^m; \alpha, \delta)$. Было показано [24], что итерационные методы градиентного типа обладают регуляризующими свойствами, а именно порождают регуляризующие семейства операторов, в которых параметром регуляризации является номер итерации.

В данной работе применяется многоуровневый градиентный метод (МГМ) [25], который является модификацией градиентного спуска, что позволяет увеличить скорость сходимости. Ранее уже были проведены численные эксперименты для подобной обратной задачи, решаемой с помощью МГМ [26].

Далее приведен алгоритм 1 многоуровневого градиентного метода.

Алгоритм 1 многоуровневого градиентного метода

Вход: Начальное приближение вектора параметров a^0 , $b^0 = a^0$, $c^0 = a^0$, параметр метода $\eta_0 = 0$.

- 1: **Пока** количество итераций $< N_{iter}$ **выполнять**
 - 2: Решить прямую задачу с набором параметров $a^{m+1} = \theta_{m+1}c^m + (1 - \theta_{m+1})b^m$.
 - 3: Для модели с набором параметров a^{m+1} решить сопряженную задачу.
 - 4: Вычислить градиент целевого функционала $\nabla M(a^{m+1}; \alpha, \delta)$.
 - 5: Вычислить приближение $b^{m+1} = a^{m+1} - \zeta_{m+1} \nabla M(a^{m+1}; \alpha, \delta)$.
 - 6: Вычислить приближение $c^{m+1} = c^m - \eta_{m+1} \nabla M(a^{m+1}; \alpha, \delta)$.
 - 7: **Конец цикла**
-

Описание параметров θ_{m+1} , ζ_{m+1} и η_{m+1} приведено в работе [12]. В численных экспериментах итерации останавливались, когда значение функционала выходило на стационарный режим.

Градиент $\nabla M(a^{m+1}; \alpha, \delta)$ целевого функционала $M(q; \alpha, \delta)$ определялся согласно следующей лемме.

Лемма. *Линейное приближение градиента целевого функционала (6) имеет вид*

$$\nabla M(q; \alpha, \delta) = -\psi(x, 1) - 2\alpha(\varphi(x) - \varphi^0(x)), \quad (8)$$

где функции $\varphi(x), \varphi^0(x) \in C^0([l_1, l_2])$ определяются из наборов параметров $q, q^0 \in Q_d$ соответственно, а функция $\psi(x, t) \in L^2((l_1, l_2) \times (1, +\infty))$ является решением сопряженной задачи

$$\begin{aligned} \psi_t &= -D\psi_{xx} - r(t)\psi + \frac{2r(t)u}{K}\psi + [\psi], \quad l_1 \leq x \leq l_2, \quad 1 \leq t \leq T, \\ \psi(x, t) &= 0, \quad l_1 \leq x \leq l_2, \\ \psi_x(l_1, t) &= \psi_x(l_2, t) = 0, \quad 1 \leq t \leq T, \\ [\psi]_{t=t_k} &= 2\gamma \left(\sum_{i=1}^{N_1} u(x_i, t_k; q) - f_k^\delta \right), \quad k = 1, \dots, N_2. \end{aligned}$$

В работе [27] приведен вывод формулы (8) для более общей постановки задачи (4) с произвольной правой частью.

Отметим, что в работах [28] и [29] для методов типа Гаусса—Ньютона было предложено выбирать шаг спуска α_m , зависящий от ошибки δ . А именно $\alpha_m = \alpha_0 \rho^m$ [28] для некоторого $\rho \in (0, 1)$ и $\alpha_m = \delta^{2/(2p+1)}$ [29] для $0 < p \leq 1$. В статьях приведены доказательства сходимости рассматриваемых методов.

2.2. Optuna

Optuna [30] — это комплекс программ, представленного на языке программирования Python, в основе которого лежит байесовский метод древовидных оценок Парзена (Tree-structured Parzen Estimator, TPE) [31].

Далее приведен алгоритм 2 метода Optuna.

Алгоритм 2 метода Optuna

- 1: Задать целевую функцию $M(q; \alpha, \delta)$ в виде (6).
 - 2: Определить границы изменения параметров $q_i, i = 1, \dots, d$ в виде $[q_i^{min}, q_i^{max}]$.
 - 3: Задать количество итераций N_O .
 - 4: Применить метод древовидных оценок Парзена для решения задачи $\min_{q \in [q^{min}, q^{max}]} M(q; \alpha, \delta)$.
-

В численных экспериментах число итераций выбиралось $N_O = 1000$, а класс решений обратной задачи $Q_d = [0, 6]^d$.

3. ЧИСЛЕННЫЕ ЭКСПЕРИМЕНТЫ

Решения задачи минимизации (6) проводилось с помощью методов МГМ, Optuna и Optuna в комбинации с МГМ (Optuna+МГМ) для зашумленных синтетических данных обратной задачи (5). Работа была выполнена с использованием ресурсов ЦКП Сибирский Суперкомпьютерный Центр ИВМиМГ СО РАН. Вычисления проводились на вычислительном узле с двумя процессорами Intel Xeon Gold 6248R,

количество ядер в каждом процессоре — 24, частота — 3 Гц, 384 Гб оперативной памяти.

3.1. Входные параметры

Прямая задача решается явным конечно-разностным методом с порядком аппроксимации $O(\tau + h^2)$ на равномерной сетке в замкнутой области $\bar{D} = \{(x, t) \mid l_1 \leq x \leq l_2, 1 \leq t \leq T\}$. Для применения классического непрерывного подхода функция начальной плотности $\varphi(x)$ определяется из вектора q интерполяцией кубическими сплайнами [26]. Согласно [6] $K = 25$, $D = 0.01$ и функция $r(t)$ имеет вид

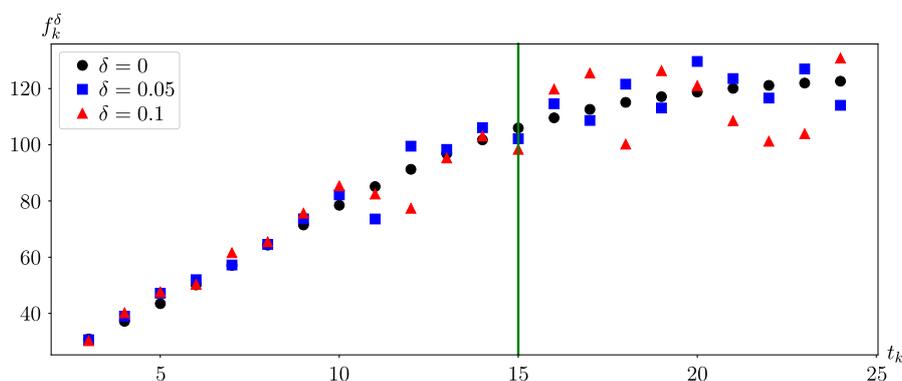
$$r(t) = \frac{\beta_2}{\beta_1} - e^{-\beta_1(t-1)} \left(\frac{\beta_2}{\beta_1} - \beta_3 \right), \text{ где } \beta_1 = 1.5, \beta_2 = 0.375, \beta_3 = 1.65.$$

В обратной задаче восстанавливаются $d = 6$ параметров, то есть $q \in Q_6$.

Положим в численных расчетах $l_1 = 1$, $l_2 = 6$, $T = 24$, $N_x = 50$ и $N_t = 575$ [26]. И в функционале А. Н. Тихонова $q_j^0 \in [0, 6]$ расположены равномерно, то есть $q^0 = (6, 4.8, 3.6, 2.4, 1.2, 0)$.

В качестве синтетических данных f_k были взяты значения решения прямой задачи в каждой десятой точке по $x < 50$ и в каждой двадцать пятой точке по $t \geq 50$, то есть $N_1 = 5$ и $N_2 = 22$. А именно: $\omega_x = \{x_i \in [0, 50] \mid x_i = ih, h = (l_2 - l_1)/N_x\}$, $\omega_t = \{t_k \in [0, 575] \mid t_k = k\tau, \tau = (T - 1)/N_t\}$. Значения параметров $q^{exact} = (5.8, 1.7, 1.9, 1, 0.95, 0.7)$ (точное решение обратной задачи) взяты из работы [6], в которой авторы моделируют данные новостного сайта Digg.com.

На рис. 1 представлены графики данных f_k^δ для уровней шума $\delta = 0, 0.05$ и 0.1 . Можно видеть, что «хвост» данных вносит значительную погрешность, поэтому мы рассматривали 2 варианта данных: $t_k \in [3, 15]$ и $t_k \in [3, 24]$.



Фиг. 1. Графики синтетических данных f_k^δ для уровней шума $\delta = 0$ (черные точки), 0.05 (синие квадраты) и 0.1 (красные треугольники).

Таблица 1. Результаты восстановления вектора неизвестных параметров $q^* \in Q_6$ по данным $f_k^{0.02}$, $t_k \in [3, 24]$ алгоритмом Optuna в случае $r(t) = 0$.

Эксперимент	Значение α	Значение функционала	err
Без регуляризации	0	$J(q^*) = 4.24 \cdot 10^{-4}$	10.63
$C = 0.01$	$4 \cdot 10^{-6}$	$M(q^*; \alpha, \delta) = 5.24 \cdot 10^{-4}$	5.44
$C = 0.5$	$2 \cdot 10^{-4}$	$M(q^*; \alpha, \delta) = 2.89 \cdot 10^{-3}$	2.69

Относительная ошибка решения обратной задачи вычислялась по формуле

$$err = \sum_{j=1}^d \frac{|q_j^{exact} - q_j^*|}{q_j^{exact}}.$$

Здесь q^* — решение задачи (7), которая соответствует минимуму функционала $M(q^*; \alpha, \delta)$ (6).

3.2. Результаты численных экспериментов

В данном разделе приведем результаты численных экспериментов для линейного случая $r(t) \equiv 0$ (то есть классическая модель диффузии) и случая $r(t) \neq 0$.

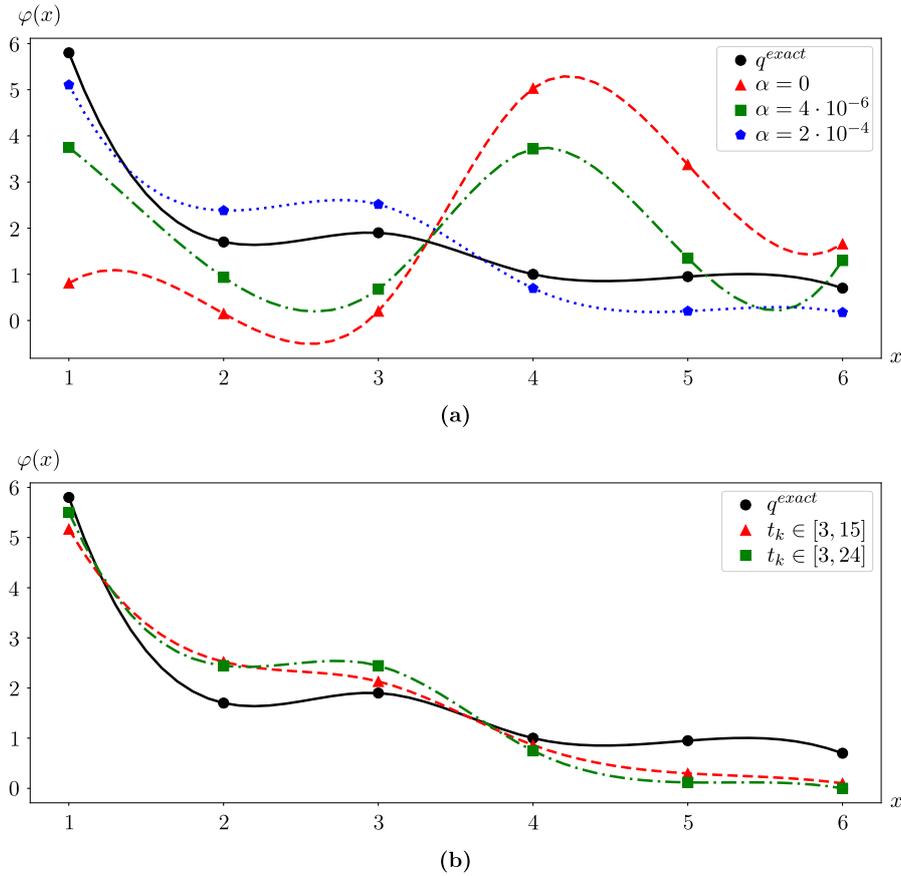
В типовом эксперименте восстановления вектора неизвестных параметров $q \in Q_6$ случая $r(t) \neq 0$ по данным $f_k^{0.05}$, $t_k \in [3, 24]$ в случае асимптотического способа выбора параметра регуляризации для $C = 0.01$ время работы метода Optuna составляет 49 секунд.

3.2.1. Линейный случай $r(t) = 0$

В таблице 1 и на рис. 2(a) представлены результаты восстановления вектора неизвестных параметров $q^* \in Q_6$ (черные точки) по данным $f_k^{0.02}$, $t_k \in [3, 24]$ алгоритмом Optuna в случае $\alpha = 0$ (без регуляризации) и асимптотического способа выбора параметра регуляризации для $C = 0.01$ и $C = 0.5$. Можно видеть, что добавление параметра регуляризации хоть и ведет к увеличению значения функционала, но приводит к уменьшению погрешности. Причем большее значение параметра C приближает решение к точному.

На рис. 2(b) представлены результаты восстановления вектора неизвестных параметров $q^* \in Q_6$ алгоритмом Optuna в случае асимптотического способа выбора параметра регуляризации для $C = 0.5$ по данным $f_k^{0.05}$ двух типов: $t_k \in [3, 15]$ и $t_k \in [3, 24]$. Можно видеть, что решения отличаются не сильно, при этом значения погрешностей $err = 2.39$ и $err = 2.91$ соответственно. То есть решение для $f_k^{0.05}$, $t_k \in [3, 15]$ ближе к точному за счет отбрасывания «хвоста».

На рис. 3 представлены результаты восстановления вектора неизвестных параметров $q^* \in Q_6$ по данным f_k^δ , $t_k \in [3, 24]$ при разных уровнях погрешности данных δ алгоритмом Optuna. Показано, что малое значение параметра (рис. 3(a)) не вносит значимых улучшений, то есть почти не добавляет регуляризации. А выбор $C = 0.5$

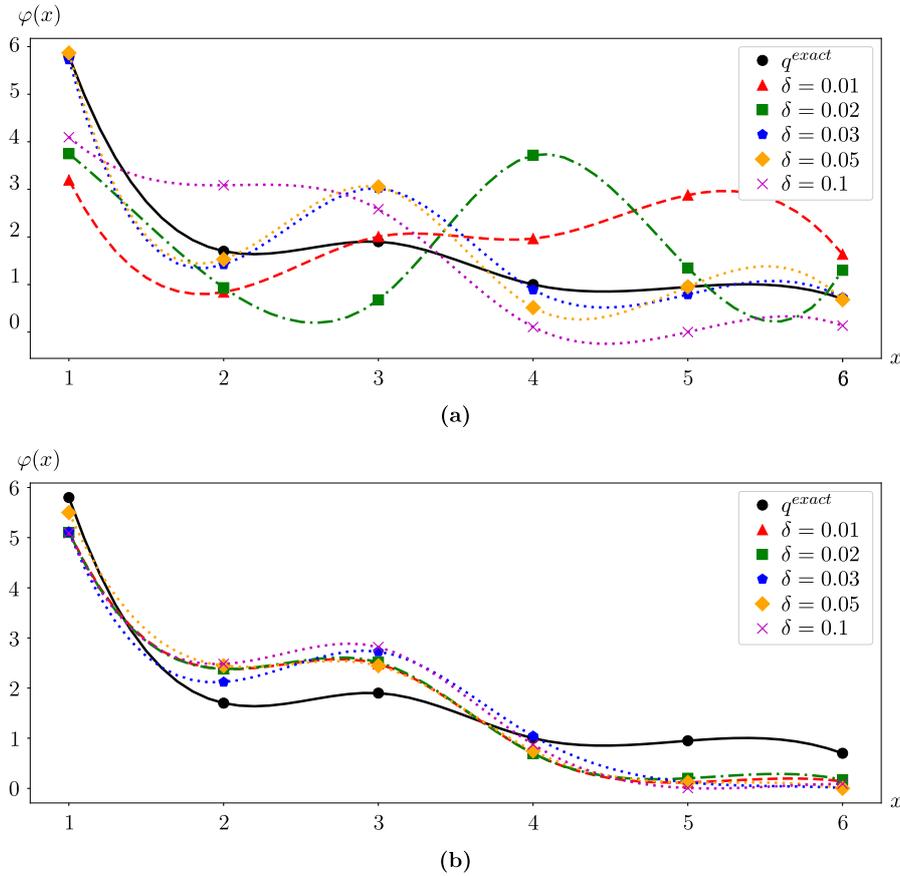


Фиг. 2. Восстановленные значения вектора параметров $q^* \in Q_6$ (а) по данным $f_k^{0.02}$, $t_k \in [3, 24]$ методом Optuna в случае $\alpha = 0$ и асимптотического способа выбора параметра регуляризации для $C = 0.01$ и $C = 0.5$; (б) по различным данным $f_k^{0.05}$ алгоритмом Optuna в случае асимптотического способа выбора параметра регуляризации для $C = 0.5$. Линиями указаны аппроксимации функции начальной плотности $\varphi(x)$ по значениям q^* для задачи (4)

позволяет для всех δ устойчиво решать поставленную обратную задачу и находить близкое решение.

На рис. 4 представлены результаты восстановления вектора неизвестных параметров $q^* \in Q_6$ по данным $f_k^{0.05}$, $t_k \in [3, 24]$ в случае асимптотического способа выбора параметра регуляризации для $C = 0.01$ методом Optuna и МГМ с начальными приближениями $x^0 = 0$ и $x^0 = q^0$. Можно видеть, что МГМ не сильно улучшает начальное приближение. И даже если в качестве начального приближения взять решение, полученное методом Optuna, МГМ незначительно уменьшает значение функционала.

Таким образом, в линейном случае регуляризация позволяет приблизить решение обратной задачи к точному и показывает результат в смысле погрешности луч-

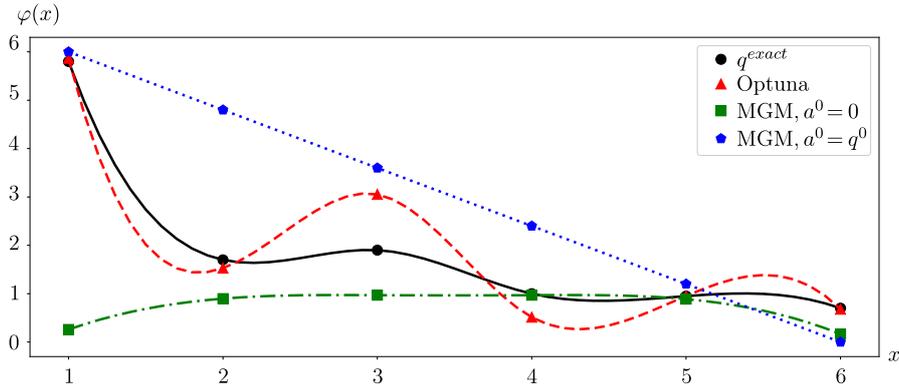


Фиг. 3. Восстановленные значения вектора параметров $q^* \in Q_6$ по данным f_k^δ , $t_k \in [3, 24]$ при разных δ алгоритмом Optuna в случае асимптотического способа выбора параметра регуляризации для а) $C = 0.01$ и б) $C = 0.5$. Линиями указаны аппроксимации функции начальной плотности $\varphi(x)$ по значениям q^* для задачи (4)

ше, чем при $\alpha = 0$ (без регуляризации). Лучшим из рассмотренных методов выбора параметры регуляризации оказался асимптотический способ с параметром $C = 0.5$. При сравнении решений обратной задачи при различных данных f_k^δ было показано, что отбрасывание «хвоста» значений дополнительной информации, который вносит дополнительный шум, приводит к небольшому улучшению точности решения. Также показано, что лучший метод ($C = 0.5$) позволяет уменьшить функционал (6) до 10^{-3} при погрешности в данных не превышающей 3% ($\delta = 0.03$).

3.2.2. Нелинейный случай $r(t) \neq 0$

В таблице 2 представлены результаты восстановления вектора неизвестных параметров $q^* \in Q_6$ по данным $f_k^{0.05}$, $t_k \in [3, 15]$, алгоритмом Optuna в случае $\alpha = 0$ (без регуляризации), асимптотического способа выбора параметра регуляризации



Фиг. 4. Восстановленные значения вектора параметров $q^* \in Q_6$ по данным $f_k^{0.05}$, $t_k \in [3, 24]$ разными методами в случае асимптотического способа выбора параметра регуляризации для $C = 0.01$. Линиями указаны аппроксимации функции начальной плотности $\varphi(x)$ по значениям q^* для задачи (4)

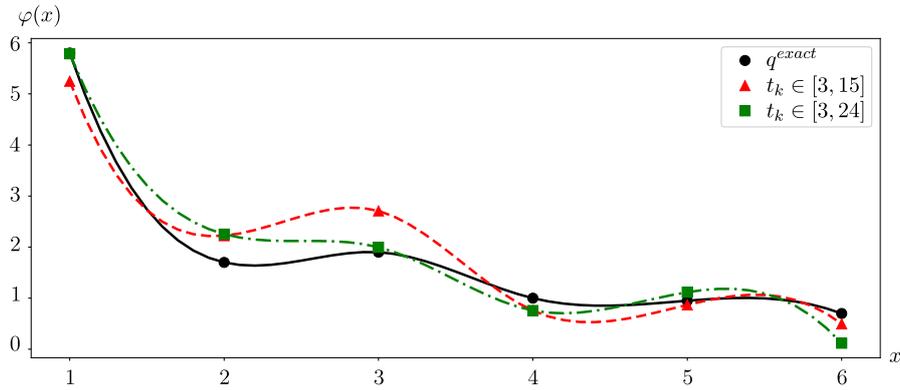
Таблица 2. Результаты восстановления вектора неизвестных параметров $q^* \in Q_6$ по данным $f_k^{0.05}$, $t_k \in [3, 15]$ алгоритмом Optuna в случае $r(t) \neq 0$.

Эксперимент	Значение α	Значение функционала	err
Без регуляризации	0	$J(q^*) = 3.56 \cdot 10^{-3}$	2.41
$C = 0.01$	$2.5 \cdot 10^{-5}$	$M(q^*; \alpha, \delta) = 3.87 \cdot 10^{-3}$	1.45
$C = 0.5$	$1.25 \cdot 10^{-3}$	$M(q^*; \alpha, \delta) = 1.07 \cdot 10^{-2}$	3.65
Способ невязки	$6.23 \cdot 10^{-6}$	$\hat{M}(q^*; \alpha; \delta) = 1.33 \cdot 10^{-3}$	3.01

для $C = 0.01$ и $C = 0.5$ и способа невязки для определения параметра регуляризации. Можно видеть, что наименьшее значение погрешности достигается в случае асимптотического способа выбора параметра регуляризации при $C = 0.01$. А увеличение параметра C , в отличие от линейного случая, не приближает решение к точному. Способ невязки в свою очередь находит оптимальное α , которое уменьшает значение функционала, но из-за неустойчивости решения обратной задачи не уменьшает относительную погрешность решения.

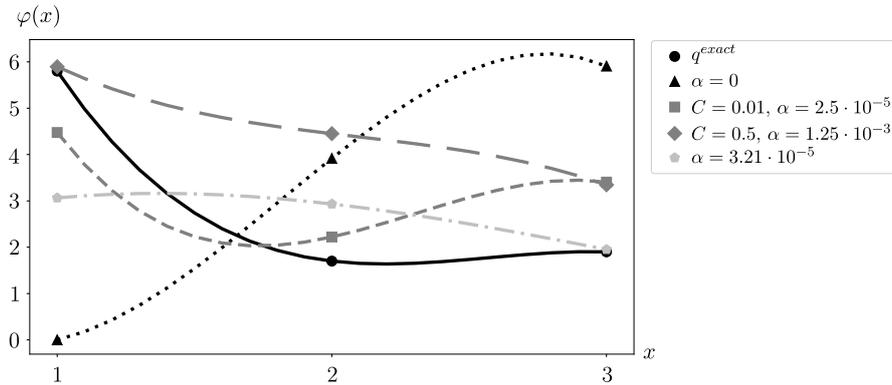
На рис. 5 представлены результаты восстановления вектора неизвестных параметров $q^* \in Q_6$ алгоритмом Optuna в случае асимптотического способа выбора параметра регуляризации для $C = 0.01$ по данным $f_k^{0.05}$ двух типов: $t_k \in [3, 15]$ и $t_k \in [3, 24]$. Можно видеть, что оба решения ближе к точному, чем в линейном случае, а значения погрешностей $err = 1.46$ и $err = 1.63$ не сильно различаются.

Мы также рассмотрели случай, когда необходимо восстановить первые три параметра, в наибольшей степени влияющие на процесс распространения, например, информации, то есть при $d = 3$. На рис. 6 представлены результаты восстановления вектора неизвестных параметров $q^* \in Q_3$ по данным $f_k^{0.05}$, $t_k \in [3, 24]$ алгоритмом Optuna в случае $\alpha = 0$ (без регуляризации), асимптотического способа выбора параметра регуляризации для $C = 0.01$ ($\alpha = 2.5 \cdot 10^{-5}$) и $C = 0.5$ ($\alpha = 1.25 \cdot 10^{-3}$) и способа



Фиг. 5. Восстановленные значения вектора параметров $q^* \in Q_6$ по различным данным $f_k^{0.05}$ алгоритмом Optuna в случае асимптотического способа выбора параметра регуляризации для $C = 0.01$. Линиями указаны аппроксимации функции начальной плотности $\varphi(x)$ по значениям q^* для задачи (4)

невязки ($\alpha = 3.21 \cdot 10^{-5}$) для определения параметра регуляризации. Наименьшее значение погрешности достигается в случае использовании способа невязки, но, как можно видеть, такое решение недостаточно качественно описывает точную функцию начальной плотности.



Фиг. 6. Восстановленные значения вектора параметров $q^* \in Q_3$ по данным $f_k^{0.05}$, $t_k \in [3, 24]$ разными методами. Линиями указаны аппроксимации функции начальной плотности $\varphi(x)$ по значениям q^* для задачи (4)

Таким образом, в нелинейном случае $r(t) \neq 0$ лучшим в смысле погрешности решения обратной задачи является метод при асимптотическом способе выбора параметра регуляризации с параметром $C = 0.01$. В данном эксперименте результаты для различных данных f_k^δ обратной задачи, как и в линейном случае, качественно не различаются. Также показано, что уменьшение количества восстанавливаемых параметров $q \in Q_d$ с $d = 6$ до $d = 3$ не улучшает решение обратной задачи (4), (5).

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Численно исследована задача восстановления начального условия в начально-краевой задаче для нелинейного уравнения типа диффузии—реакции по зашумленным данным интегрального типа в фиксированные моменты времени (обратная задача). Такая задача является некорректной, поэтому в работе решение обратной задачи было сведено к решению задачи минимизации функционала А. Н. Тихонова. Параметр регуляризации определялся несколькими способами, показана эффективность применения к рассмотренной задаче асимптотического способа выбора параметра регуляризации. Проведен численный анализ регуляризованных решений обратной задачи для линейной и нелинейной постановок начально-краевых задач для уравнения диффузии—реакции. В линейном случае результаты численных расчетов согласовываются с теорией регуляризации А. Н. Тихонова. Показано, что в обоих случаях уменьшение количества данных, которые вносят дополнительный шум, не приводит к значимым улучшениям решения обратных задач, а также в нелинейной постановке уменьшение количества восстанавливаемых неизвестных параметров источника возмущений не улучшает решение обратной задачи.

Дальнейшее развитие научного исследования предполагает учет управления исследуемыми процессами в параметре регуляризации и тестирование разработанного алгоритма на реальных данных.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Fischer J.* Global existence of renormalized solutions to entropy-dissipating reaction-diffusion systems // Arch. Ration. Mech. Anal. 2015. V. 218, N 1. P. 553–587.
2. *Перминов А. В., Никулин И. Л.* Математическая модель процессов тепломассопереноса и диффузии магнитного поля в индукционной печи // Инженер.-физ. журн. 2016. Т. 89, № 2. С. 388–399.
3. *Pyatkov S. G., Safonov E. I.* Point sources recovering problems for the one-dimensional heat equation // J. Adv. Res. Dyn. Control. Syst. 2019. V. 11, N 1. P. 496–510.
4. *Пененко А. В.* Метод Ньютона—Канторовича для решения обратных задач идентификации источников в моделях продукции—деструкции с данными типа временных рядов // Сиб. журн. вычисл. матем. 2019. Т. 22, № 1. С. 57–79.
5. *Колмогоров А. Н., Петровский И. Г., Пискунов Н. С.* Исследование уравнения диффузии, соединенной с возрастанием вещества, и его применение к одной биологической проблеме // Бюл. МГУ. Сер. А. Матем. и мех. 1937. Т. 1, № 6. С. 1–26.
6. *Wang F., Wang H., Xu K., Wu J., Jia X.* Characterizing Information Diffusion in Online Social Networks with Linear Diffusive Model // Proc. ICDCS. 2013. P. 307–316.

7. *Krivorotko O., Zvonareva T., Zyatkov N.* Numerical solution of the inverse problem for diffusion-logistic model arising in online social networks // Commun. Comput. Info. Sci. 2021. V. 1476. P. 444–459.
8. *Lachapelle A.* Human Crowds and Groups Interactions: a Mean Field Games Approach // HAL. 2010. <https://hal.science/hal-00484097>
9. *Amann H., Quittner V.* Optimal control problems governed by semilinear parabolic equations with low regularity data // Adv. Differ. Equ. 2006. V. 11, N 1. P. 1–33.
10. *Kabanikhin S.* Definitions and examples of inverse and ill-posed problems // J. Inverse Ill-Posed Probl. 2009. V. 16, N 4. P. 317–357.
11. *Тухонов А. Н., Гончарский А. В., Степанов В. В., Ягола А. Г.* Регуляризирующие алгоритмы и априорная информация. М.: Наука, 1983.
12. *Звонарева Т. А., Кабанихин С. И., Криворотко О. И.* Численный алгоритм определения источника диффузионно-логистической модели по данным интегрального типа, основанный на тензорной оптимизации // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2023. Т. 63, № 9. С. 1513–1523.
13. *Guerngar N., Nane E., Tinaztepe R., Ulusoy S., Van Wyk H. W.* Simultaneous inversion for the fractional exponents in the space-time fractional diffusion equation Fract. Calc. Appl. Anal. 2021. V. 24. P. 818–847.
14. *Brociek R., Wajda A., Slota D.* Inverse problem for a two-dimensional anomalous diffusion equation with a fractional derivative of the Riemann–Liouville type Energies. 2021. V. 14, N 11. Article 3082.
15. *Brociek R., Wajda A., Slota D.* Comparison of heuristic algorithms in identification of parameters of anomalous diffusion model based on measurements from sensors Sensors. 2023. V. 23, N 3. Article 1722.
16. *Zeki M., Tinaztepe R., Tatar S., Ulusoy S., Al-Hajj R.* Determination of a nonlinear coefficient in a time-fractional diffusion equation Fractal Fract. 2023. V. 7, N 5. Article 371.
17. *Argun R., Gorbachev A., Levashova N., Lukyanenko D.* Inverse Problem for an Equation of the Reaction–Diffusion–Advection Type with Data on the Position of a Reaction Front: Features of the Solution in the Case of a Nonlinear Integral Equation in a Reduced Statement Mathematics. 2021. V. 9, N 18. Article 2342.
18. *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 Commun. Nonlinear Sci. Numer. Simul. 2021. V. 99. Article 105824.
19. *Liu T., Ding Z., Yu J., Zhang W.* Parameter Estimation for Nonlinear Diffusion Problems by the Constrained Homotopy Method Mathematics. 2023. V. 11, N 12. Article 2642.

20. *Тихонов А. Н.* Об устойчивости обратных задач // Докл. АН СССР. 1943. Т. 39, № 5. С. 195–198.
21. *Тихонов А. Н., Арсенин В. Я.* Методы решения некорректных задач. М.: Наука, 1986.
22. *Иванов В. К., Васин В. В., Танана В. П.* Теория линейных некорректных задач и ее приложения. М.: Наука, 1978.
23. *Слизиков В. С.* Анализ методов локальной регуляризации и формулировка метода субоптимальной фильтрации решения уравнений I рода // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 1999. Т. 39, № 5. С. 718–733.
24. *Алифанов О. М., Артюхин Е. А., Румянцев С. В.* Экстремальные методы решения некорректных задач и их приложения к обратным задачам теплообмена. М.: Наука, 1988.
25. *Gasnikov A. V., Nesterov Y. E.* Universal method for stochastic composite optimization problems // Comput. Math. Math. Phys. 2018. V. 58, N 1. P. 48–64.
26. *Звонарева Т. А., Криворотько О. И.* Сравнительный анализ градиентных методов определения источника диффузионно-логистической модели // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2022. Т. 62, № 4, С. 694–704.
27. *Krivorotko O., Kabanikhin S., Zhang S., Kashtanova V.* Global and local optimization in identification of parabolic systems // J. Inverse Ill-Posed Probl. 2020. V. 28, N 6. P. 899–913.
28. *Kaltenbacher B.* All-at-once versus reduced iterative methods for time dependent inverse problems // Inverse Probl. 2017. V. 33. Article 064002.
29. *Vasin V. V.* Solving Nonlinear Inverse Problems Based on the Regularized Modified Gauss–Newton // Method. Dokl. Math. 2022. V. 105. P. 175–177.
30. *Akiba T., Sano Sh., Yanase T., Ohta T., Koyama M.* Optuna: A Next-generation Hyperparameter Optimization Framework // Proc. 25th ACM SIGKDD Int. Conf. Knowl. Discov. Data Min. 2019. P. 2623–2631.
31. *Bergstra J., Bardenet R., Bengio Y., Kégl B.* Algorithms for hyperparameter optimization // Proc. NIPS. 2011. P. 2546–2554.