

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

Т.А. Звонарева , **О.И. Криворотко** 

Представлено М.А. Шишлениным

Abstract: The problem of recovery the initial condition in the initial boundary value problem for the nonlinear diffusion—reaction type equation on the basis of noisy data of integral type at fixed times is incorrect (inverse problem). In this paper the solution of the inverse problem is reduced to the solution of the problem of minimisation of the A.N. Tikhonov functional, in which the regularisation parameter is determined in various ways. Numerical analysis of regularised solutions of the inverse problem for linear and nonlinear formulation is given, the efficiency of regularisation of the numerical solution at a fixed noise level in the data is shown.

Keywords: source problem, inverse problem, reaction—diffusion model, regularisation, gradient methods.

ZVONAREVA T.A., KRIVOROTKO O.I., REGULARIZATION OF THE NUMERICAL SOLUTION OF THE SOURCE PROBLEM FOR A NONLINEAR DIFFUSION-LOGISTIC MODEL.

© 2025 Звонарева Т.А., Криворотко О.И.

Постановки 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).

Поступила 10 апреля 2025 г., опубликована 11 августа 2025 г.

1 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 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 $u(\mathbf{x}, t) = (\mathbf{v}, T)$ — 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 $u(\mathbf{x}, t) = (u_1, u_2, \dots)$ — концентрация рассматриваемых веществ, $\Omega \subset \mathbb{R}^n$, $g = \sum_{i=1}^m N_i(t)\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) + \tilde{g}(\mathbf{x}, t)$, $N_i(t)$ — 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, $\Omega \subset \mathbb{R}^n$, $v = 0$, $g(u) = (1 - u/K)r(t)u$, 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, $\Omega \subset \mathbb{R}^2$, $v = (v^1, v^2)$ — 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, $\Omega \subset \mathbb{R}^n$, $v = 0$, $g(u) = g(\mathbf{x}, t, u, \nabla u) + u_{control}$, $u_{control}$ — 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 v и D , функции g и начального условия φ по дополнительной информации вида

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

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 переопределения $u(\mathbf{y}_i, t)$. 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, 14, 15, 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 2 приведены формулировки прямой и обратной задач для диффузионно-логистической модели. В разделе 3 сформулирован алгоритм регуляризации численного решения обратной задачи. В разделе 4 приведены численные эксперименты для синтетических данных при различном выборе параметра регуляризации.

2 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:

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

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].

3 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 пюзда 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 [20, 11]:

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

с параметром регуляризации $\alpha \geq 0$ и некоторым приближением к точному решению q^0 (см. пункт 4.1). 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.

3.1. 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

$$\psi_t = -D\psi_{xx} - r(t)\psi + \frac{2r(t)u}{K}\psi + [\psi], \quad l_1 \leq x \leq l_2, \quad 1 \leq t \leq T,$$

$$\psi(x, t) = 0, \quad l_1 \leq x \leq l_2,$$

$$\psi_x(l_1, t) = \psi_x(l_2, t) = 0, \quad 1 \leq t \leq T,$$

$$[\psi]_{t=t_k} = 2\gamma \left(\sum_{i=1}^{N_1} u(x_i, t_k; q) - f_k^\delta \right), \quad k = 1, \dots, N_2.$$

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.

3.2. 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 $Q_d = [0, 6]^d$.

4 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.

4.1. 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 рисунке 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 $t_k \in [3, 24]$.

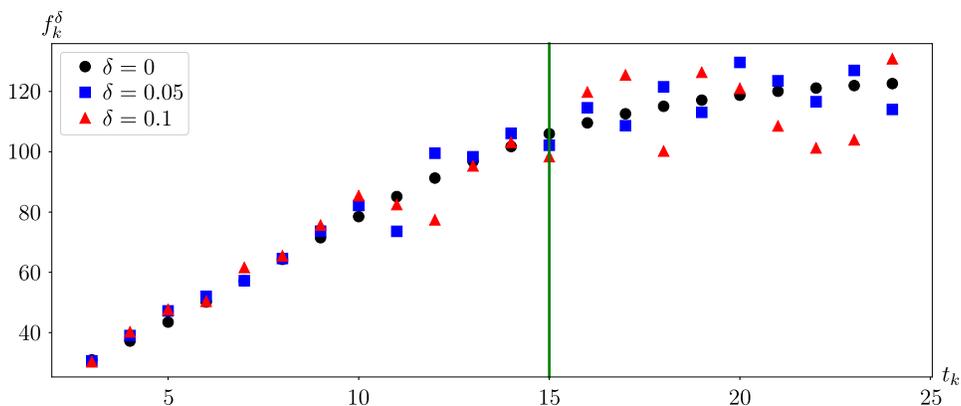


Рис. 1. Графики синтетических данных f_k^δ для уровней шума $\delta = 0$ (черные точки), 0.05 (синие квадраты) и 0.1 (красные треугольники).

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).

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

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	<i>err</i>
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

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.

4.2.1. Линейный случай $r(t) = 0$. В таблице 1 и на рисунке 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 рисунке 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 рисунке 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 (рисунок 3(a)) не вносит значимых улучшений, то есть почти не добавляет регуляризации. А выбор $C = 0.5$ позволяет для всех δ устойчиво решать поставленную обратную задачу и находить близкое решение.

На рисунке 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.

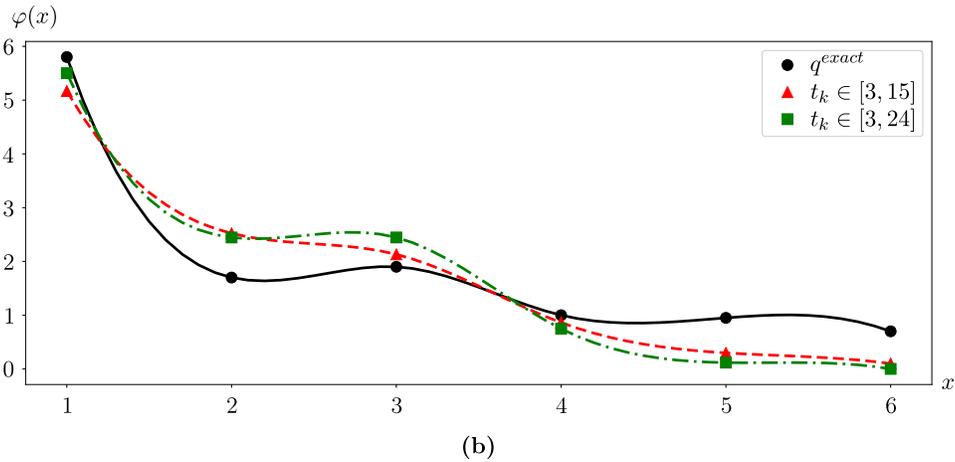
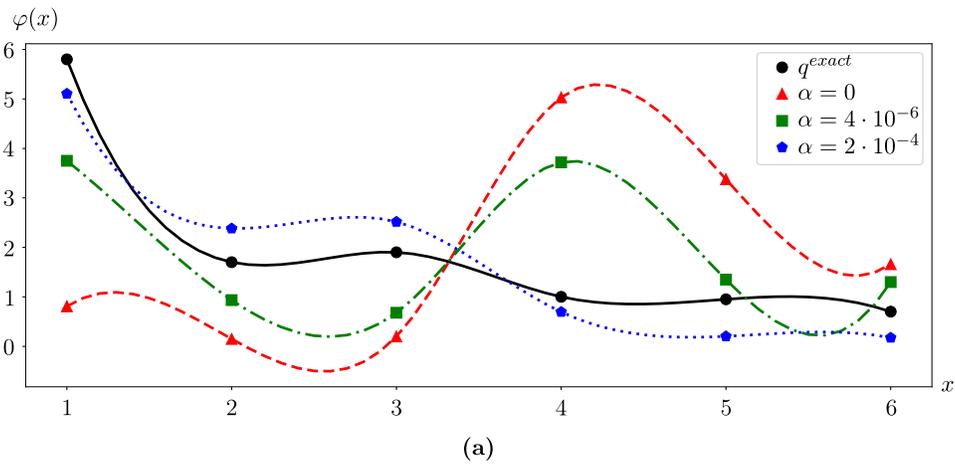


Рис. 2. Восстановленные значения вектора параметров $q^* \in Q_6$ (а) по данным $f_k^{0.02}$, $t_k \in [3, 24]$ методом Optuna в случае $\alpha = 0$ и асимптотического способа выбора параметра регуляризации для $C = 0.01$ и $C = 0.5$; (б) по различным данным $f_k^{0.05}$ алгоритмом Optuna в случае асимптотического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

Таким образом, в линейном случае регуляризация позволяет приблизить решение обратной задачи к точному и показывает результат в смысле погрешности лучше, чем при $\alpha = 0$ (без регуляризации). Лучшим из рассмотренных методов выбора параметры регуляризации оказался

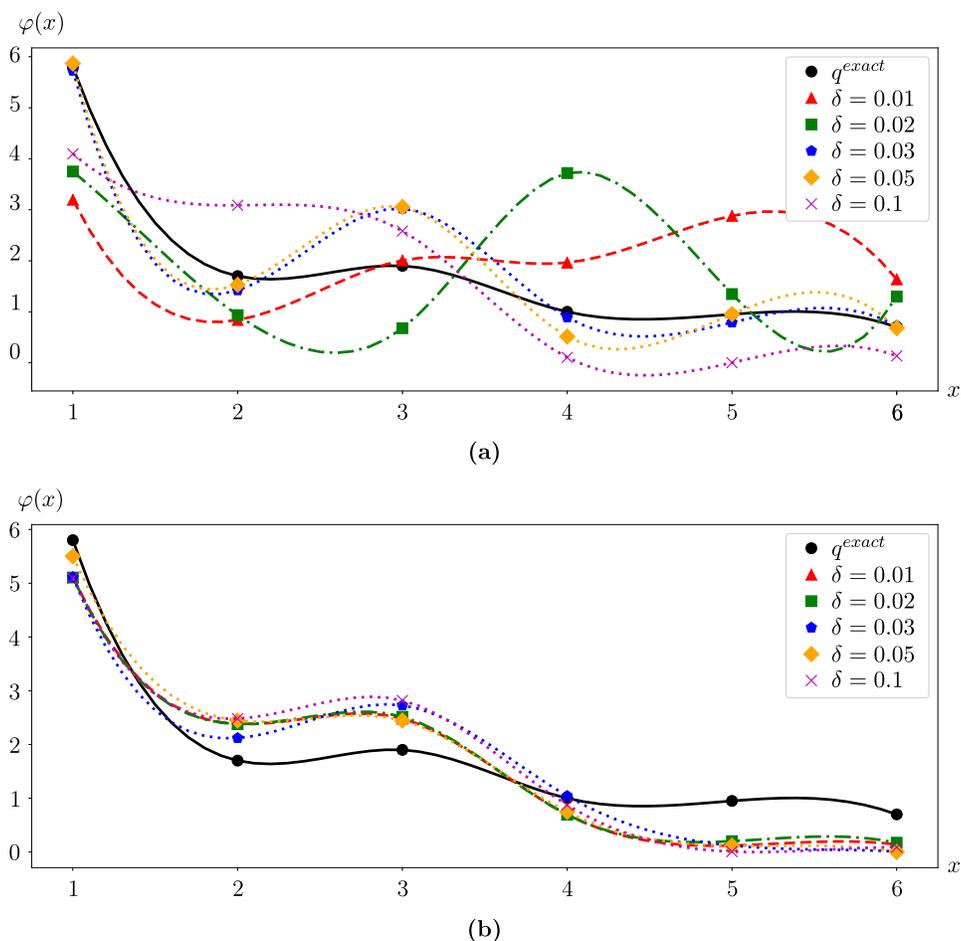


Рис. 3. Восстановленные значения вектора параметров $q^* \in Q_6$ по данным f_k^δ , $t_k \in [3, 24]$ при разных δ алгоритмом Ортуна в случае асимптотического способа выбора параметра регуляризации для а) $C = 0.01$ и б) $C = 0.5$. Линиями указаны аппроксимации функции начальной плотности $\varphi(x)$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

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% ($\delta = 0.03$).

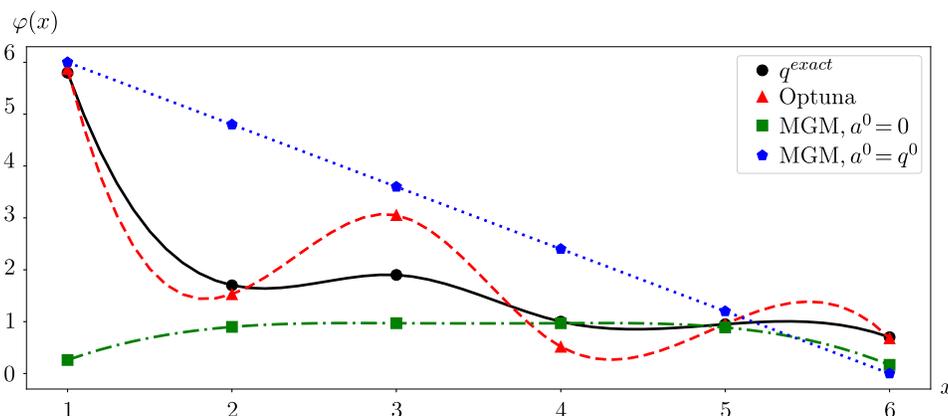


Рис. 4. Восстановленные значения вектора параметров $q^* \in Q_6$ по данным $f_k^{0.05}$, $t_k \in [3, 24]$ разными методами в случае асимптотического способа выбора параметра регуляризации для $C = 0.01$. Линиями указаны аппроксимации функции начальной плотности $\varphi(x)$ по значениям q^* для задачи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

4.2.2. 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 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 рисунке 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.

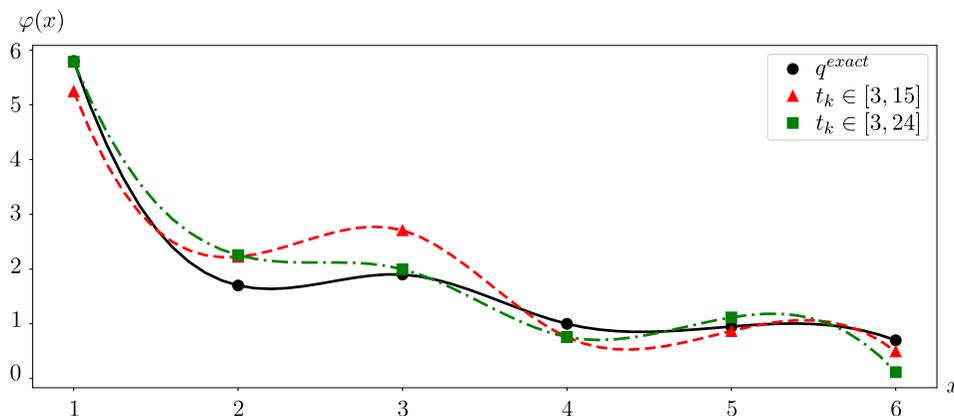


Рис. 5. Восстановленные значения вектора параметров $q^* \in Q_6$ по различным данным $f_k^{0.05}$ алгоритмом Optuna в случае асимптотического способа выбора параметра регуляризации для $C = 0.01$. Линиями указаны аппроксимации функции начальной плотности $\varphi(x)$ по значениям q^* для задачи (4)

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 рисунке 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 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.

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).

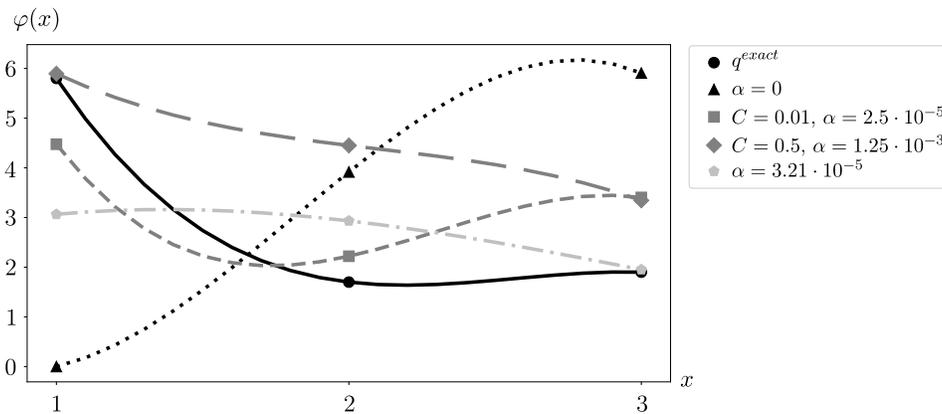


Рис. 6. Восстановленные значения вектора параметров $q^* \in Q_3$ по данным $f_k^{0.05}$, $t_k \in [3, 24]$ разными методами. Линиями указаны аппроксимации функции начальной плотности $\varphi(x)$ по значениям q^* для задачи (4)

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.

References

- [1] J. Fischer, *Global existence of renormalized solutions to entropy-dissipating reaction-diffusion systems*, Arch. Ration. Mech. Anal., **218**:1 (2015), 553–587. Zbl 1323.35175
- [2] A.V. Perminov, I.L. Nikulin, *Mathematical model of the processes of heat and mass transfer and diffusion of the magnetic field in an induction furnace*, J. Eng. Phys. Thermophys., **89**:2 (2016), 397–409.
- [3] S.G. Pyatkov, E.I. Safonov, *Point sources recovering problems for the one-dimensional heat equation*, J. Adv. Res. Dyn. Control. Syst., **11**:1, SI (2019), 496–510.
- [4] A.V. Penenko, *The Newton-Kantorovich method in inverse source problems for production-destruction models with time series-type measurement data*, Num. Anal. Appl., **12**:1 (2019), 51–69. Zbl 7607904
- [5] A. Kolmogorov, I. Petrovskii, N. Piscounov, *Study of the diffusion equation with growth of the quantity of matter and its application to a biological problem*, Byull. Mosk. Gos. Univ. Mat. Mekh., **1**:6 (1937), 1–25. Zbl 0018.32106
- [6] F. Wang, H. Wang, K. Xu, J. Wu, X. Jia, *Characterizing information diffusion in online social networks with linear diffusive model*, 2013 IEEE 33rd International Conference on Distributed Computing Systems, IEEE, Philadelphia, 2013, 307–316.
- [7] O. Krivorotko, T. Zvonareva, N. Zyatkov, *Numerical solution of the inverse problem for diffusion-logistic model arising in online social networks*, Commun. Comput. Info. Sci., **1476**, Springer, Cham, 2021, 444–459. MR4348070
- [8] A. Lachapelle, *Human Crowds and Groups Interactions: a Mean Field Games Approach*, Preprint, HAL, 2010, hal-00484097.
- [9] H. Amann, P. Quittner, *Optimal control problems governed by semilinear parabolic equations with low regularity data*, Adv. Differ. Equ., **11**:1 (2006), 1–33. Zbl 1106.49005
- [10] S. Kabanikhin, *Definitions and examples of inverse and ill-posed problems*, J. Inverse Ill-Posed Probl., **16**:4 (2008), 317–357. Zbl 1170.35100
- [11] A.N. Tikhonov, A.V. Goncharskii, V.V. Stepanov, A.G. Yagola, *Regularizing algorithms and a priori information*, Nauka, Moscow, 1983. Zbl 0529.65027
- [12] T.A. Zvonareva, S.I. Kabanikhin, O.I. Krivorotko, *Numerical algorithm for source determination in a diffusion-logistic model from integral data based on tensor optimization*, Comput. Math. Math. Phys., **63**:9 (2023), 1654–1663. Zbl 1550.65170
- [13] N. Guerngar, E. Nane, R. Tinaztepe, S. Ulusoy, H.W. Van Wyk, *Simultaneous inversion for the fractional exponents in the space-time fractional diffusion equation $\partial_t^\beta u = -(-\Delta)^{\alpha/2}u - (-\Delta)^{\gamma/2}u$* , Fract. Calc. Appl. Anal., **24**:3 (2021), 818–847. Zbl 1498.35572
- [14] R. Brociek, A. Wajda, D. Slota, *Inverse problem for a two-dimensional anomalous diffusion equation with a fractional derivative of the Riemann-Liouville type*, Energies, **14**:11 (2021), Article ID 3082.
- [15] R. Brociek, A. Wajda, D. Slota, *Comparison of heuristic algorithms in identification of parameters of anomalous diffusion model based on measurements from sensors*, Sensors, **23**:3 (2023), Article ID 1722.
- [16] M. Zeki, R. Tinaztepe, S. Tatar, S. Ulusoy, R. Al-Hajj, *Determination of a nonlinear coefficient in a time-fractional diffusion equation*, Fractal Fract., **7**:5 (2023), Article ID 371.
- [17] R. Argun, A. Gorbachev, N. Levashova, D. Lukyanenko, *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, **9**:18 (2021), Article ID 2342.

- [18] D.V. Lukyanenko, A.A. Borzunov, M.A. Shishlenin, *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., **99** (2021), Article ID 105824. Zbl 1471.65123
- [19] T. Liu, Z. Ding, J. Yu, W. Zhang, *Parameter estimation for nonlinear diffusion problems by the constrained homotopy method*, Mathematics, **11**:12 (2023), Article ID 2642.
- [20] A.N. Tikhonov, *On the stability of inverse problems*, Dokl. Akad. Nauk SSSR, n. Ser., **39**:5 (1943), 176–179. Zbl 0061.23308
- [21] A.N. Tikhonov, V.I. Arsenin, *Methods for the solution of ill-posed problems*, Nauka, Moscow, 1986. (1979, Zbl 0499.65030)
- [22] V.K. Ivanov, V.V. Vasin, V.P. Tanana, *Theory of linear ill-posed problems and applications*, Nauka, Moscow, 1978. Zbl 0489.65035
- [23] V.S. Sizikov, *Analysis of local regularization methods and formulation of suboptimal filtration method for an equation of the first kind*, Comput. Math. Math. Phys., **39**:5 (1999), 686–701. Zbl 0970.65057
- [24] O.M. Alifanov, E.A. Artyukhin, S.V. Rumyantsev, *Extremal methods for the solution of ill-posed problems and their applications to inverse problems of heat transfer*, Nauka, Moscow, 1988. Zbl 0657.35003
- [25] A.V. Gasnikov, Yu.E. Nesterov, *Universal method for stochastic composite optimization problems*, Comput. Math. Math. Phys., **58**:1 (2018), 48–64. Zbl 1457.90099
- [26] T.A. Zvonareva, O.I. Krivorotko, *Comparative analysis of gradient methods for source identification in a diffusion-logistic model*, Comput. Math. Math. Phys., **62**:4 (2022), 674–684. Zbl 1492.91255
- [27] O. Krivorotko, S. Kabanikhin, S. Zhang, V. Kashtanova, *Global and local optimization in identification of parabolic systems*, J. Inverse Ill-Posed Probl., **28**:6 (2020), 899–913. Zbl 1460.35394
- [28] B. Kaltenbacher, *All-at-once versus reduced iterative methods for time dependent inverse problems*, Inverse Probl., **33**:6 (2017), Article ID 064002. Zbl 1433.65197
- [29] V.V. Vasin, *Solving nonlinear inverse problems based on the regularized modified Gauss-Newton method*, Dokl. Math., **105**:3 (2022), 175–177. Zbl 1502.65029
- [30] T. Akiba, Sh. Sano, T. Yanase, T. Ohta, M. Koyama, *Optuna: A next-generation hyperparameter optimization framework*, Proc. 25th ACM SIGKDD Int. Conf. Knowl. Discov. & Data Min., 2019, 2623–2631.
- [31] J. Bergstra, R. Bardenet, Y. Bengio, B. Kégl, *Algorithms for hyper-parameter optimization*, Proc. NIPS, 2011, 2546–2554.

TATIANA ALEKSANDROVNA ZVONAREVA
 SOBOLEV INSTITUTE OF MATHEMATICS,
 PR. KOPTYUGA, 4,
 630090, NOVOSIBIRSK, RUSSIA
 Email address: t.zvonareva@ngs.ru

OLGA IGOREVNA KRIVOROTKO
 SOBOLEV INSTITUTE OF MATHEMATICS,
 PR. KOPTYUGA, 4,
 630090, NOVOSIBIRSK, RUSSIA,
 YUGRA UNIVERSITY,
 CHEKHOVA STR., 16,
 628012, KHANTY-MANSIYSK, RUSSIA
 Email address: krivorotko.olya@mail.ru