

О ВАРИАЦИОННОМ ИНТЕРПОЛИРОВАНИИ РЕЗУЛЬТАТОВ РЕШЕНИЯ НЕСКОЛЬКИХ ОПОРНЫХ ЗАДАЧ

В. В. Учайкин¹, В. А. Литвинов², Е. В. Кожемякина¹, И. И. Кожемякин¹,

¹ Ульяновский государственный университет, 432017, Ульяновск

² Барнаульский юридический институт МВД России, 656038, Барнаул

УДК 517.97

Известно, что двойственное представление задач (через основную и сопряженную в смысле Лагранжа функции) позволяет сформулировать эффективную версию теории малых возмущений (Л.Н. Усачёв, Г.И. Марчук, В.В. Орлов и др.) [1, 2], однако попытки расширить область применения путём повышения порядка теории возмущений резко усложняют процедуру решения (С.Б. Шихов и др.) [3]. В связи с этим, в ряде работ были предприняты поиски альтернативных подходов. К их числу относится и наш подход, в котором в качестве основной («невозмущённой») задачи предлагается выбирать не одну, а несколько.

В настоящем докладе продолжаются исследования особенностей этого метода, начатые в [4] для однопараметрической задачи. Здесь речь идёт о стационарной диффузии в бесконечной (с поглощением) среде от плоского равномерного в конечном слое источника и исследуется усреднённая по нему концентрация. В этой задаче два параметра (коэффициент диффузии и коэффициент поглощения), образующие систему координат пространства моделей. Рассматривается несколько расположений опорных точек, показываются области ограниченной заданными значениями относительной погрешности. Сопоставление с точными решениями свидетельствует о высокой эффективности предлагаемого метода по сравнению с теорией возмущений.

Ключевые слова: Теория возмущений, сопряжённые функции, вариационный функционал

Введение

Математически, идею исследуемого метода можно представить следующим образом. Рассматривается задача о вычислении значения линейного функционала

$$J = (w, f) \equiv \int w(x)f(x)dx, \quad x \in \mathbb{R}^d,$$

где f — решение уравнения

$$Lf = s \tag{1}$$

с известным оператором L и известной правой частью $s = s(x)$. В задачах теории переноса функция s характеризует распределение источников в фазовом пространстве, f — создаваемое ими поле, а $w(x)f(x)dx$ — реакцию элемента dx чувствительного объёма детектора на создаваемое в этом элементе поле $f(x)$. Тот же самый функционал может быть представлен и через решение сопряжённого (в лагранжевом смысле) уравнения

$$L^+ f^+ = w \tag{2},$$

при этом линейный функционал примет вид

$$J = (f^+, s) \equiv \int f^+(x)s(x)dx.$$

Оператор L в реальных задачах имеет сложный вид, и процедура решения задачи (1) требует значительных затрат времени, тогда как математическое сопровождение технологического процесса конструирования,

изготовления и настройки сложнейших современных устройств нуждается в более оперативных вычислительных средствах.

Одним из таких средств является теория возмущений, в которой вычисления разбиваются на два этапа: вначале находится грубое (нулевое) приближение к решению задачи, называемое часто невозмущённым решением,

$$J_0 = (w, f_0) = (f_0^+, s),$$

где f_0 и f_0^+ — решения уравнений (1) и (2) с теми же правыми частями, но с операторами L_0 и L_0^+ соответственно. В рамках этой теории (см. напр. [5]), искомый функционал представляется в виде ряда

$$J = J_0 + (f_0^+, V f_0) + (f_0^+, V G_0 V f_0) + \dots, \quad (3)$$

где $V = L_0 - L$ — возмущение управляющего оператора, $G_0 = L^{-1}$ — оператор Грина невозмущённой задачи, а $f_0^+ = G_0^+ w$ — невозмущённая сопряжённая функция (ценность).

1 Вариационное интерполирование

Теория возмущений первого порядка позволяет получить приближённое решение в окрестности единственной опорной точки («нулевого приближения»), однако попытки расширить область применения путём повышения порядка теории возмущений резко усложняют процедуру решения. Вариационное же интерполирование основывается на использовании нескольких опорных точек (в пространстве моделей), для которых известны решения (в двойственном представлении). Искомый же функционал ищется в виде стационарного функционала от линейной комбинации опорных решений.

Вариационный функционал $\mathcal{J}(\phi^+(\cdot), \phi(\cdot))$ обладает следующими свойствами:

1) на функциях f^+ и f , являющихся точными решениями соответствующих уравнений, он дает точное значение величины J ;

2) при малых погрешностях в задании этих функций, его значения отличаются от точного на величину высшего порядка малости.

Другими словами, на точном решении задачи, задаваемом парой функций f^+ и f , функционал \mathcal{J} должен быть стационарен: его вариационные производные первого порядка должны обращаться в нуль:

$$\delta \mathcal{J} / \delta f^+(x) = 0,$$

$$\delta \mathcal{J} / \delta f(x) = 0.$$

Простейшим примером такого функционала является билинейный функционал [1]

$$\mathcal{J}(f^+, f) = (w, f) + (f^+, s) - (f^+, Lf), \quad (4)$$

который и используется в настоящей работе.

Отметив опорные операторы и соответствующие им функции индексами, принимающими значения от 1 до n (число опорных операторов), представим входящие в (4) функции в виде линейных суперпозиций решений опорных задач с теми же самыми правыми частями $s(x)$ и $w(x)$,

$$f^+(x) = \sum_{i=1}^n c_i^+ f_i^+(x), \quad f(x) = \sum_{i=1}^n c_i f_i(x), \quad (5)$$

а условия стационарности

$$\frac{\partial}{\partial c_i} \mathcal{J} \left(\sum c_i^+ f_i^+, \sum c_i f_i \right) = 0,$$

$$\frac{\partial}{\partial c_i^+} \mathcal{J} \left(\sum c_i^+ f_i^+, \sum c_i f_i \right) = 0.$$

Подстановкой (5) приводим их к системе уравнений

$$\sum_{i=1}^n L_{ik} c_i^+ = J_k, \quad \sum_{i=1}^n L_{ki} c_i = J_k, \quad k = 1, 2, \dots, n, \quad (6)$$

где $L_{ij} = L_{ij}(L) = (f_i^+, Lf_j)$. Решая систему (6), подставляя результат в аппроксимации (5) и заменяя ими точные функции f^+ и f в вариационном функционале (4), получаем приближённое (*интерполяционное*) значение искомого функционала

$$\tilde{J} = \mathcal{J} \left(\sum_{i=1}^n c_i^+ f_i^+(\cdot), \sum_{i=1}^n c_i f_i(\cdot) \right).$$

2 Описание задачи

В слое $(-1, 1)$ бесконечной однородной среды с коэффициентом поглощения диффундирующих частиц σ и коэффициентом диффузии d равномерно распределён стационарный источник с плотностью $s = 1/2$ (рис. 1). Процесс описывается уравнением диффузии

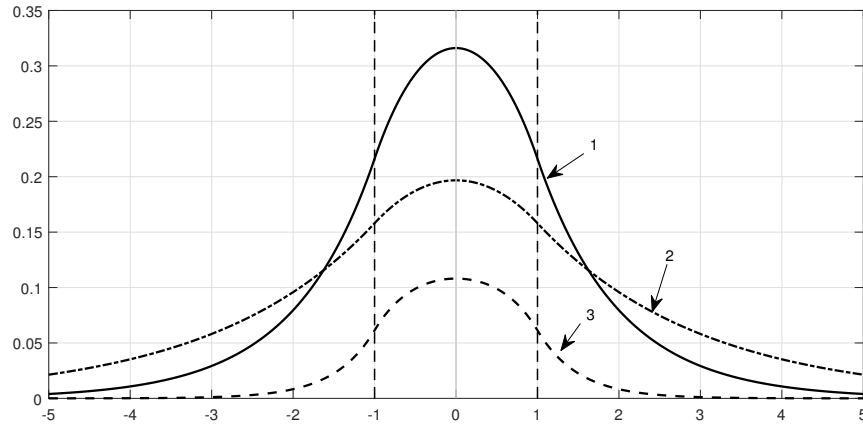


Рис. 1: Значение искомого функционала. 1 — для $(\sigma = 1, d = 1)$, 2 — для $(\sigma = 1, d = 2)$, 3 — для $(\sigma = 2, d = 1)$.

$$-df''(x) + \sigma f(x) = s(x), \quad s(x) = \begin{cases} 1/2, & |x| < 1; \\ 0, & |x| > 1, \end{cases}$$

функция Грина которого имеет вид

$$g(x, x') = \frac{1}{2\sqrt{\sigma d}} e^{-\sqrt{\sigma/d}|x-x'|}, \quad -\infty < x < \infty,$$

позволяющий представить основную и сопряжённую функции задачи в аналитическом виде:

$$f(x) = f^+(x) = \begin{cases} \frac{1}{2\sigma} \left[1 - e^{-\sqrt{\sigma/d}} \operatorname{ch}(\sqrt{\sigma/d} x) \right], & |x| < 1; \\ \frac{1}{2\sigma} e^{-\sqrt{\sigma/d}|x|} \operatorname{sh}(\sqrt{\sigma/d}), & |x| > 1. \end{cases}$$

Искомый функционал

$$J = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 f(x) dx = \frac{1}{4\sigma} \left[2 - \sqrt{d/\sigma} \left(1 - e^{-2\sqrt{\sigma/d}} \right) \right]. \quad (7)$$

3 Демонстрация погрешности интерполяции

Перепишем $f(x)$ в экспоненциальной форме:

$$f(x) = \begin{cases} \frac{1}{4\sigma} \left(e^{(|x|+1)\sqrt{\sigma/d}} - e^{(|x|-1)\sqrt{\sigma/d}} \right), & |x| \geq 1, \\ \frac{1}{4\sigma} \left(2 - e^{-(|x|+1)\sqrt{\sigma/d}} - e^{(|x|-1)\sqrt{\sigma/d}} \right), & |x| < 1. \end{cases}$$

Для вычисления J необходимо будет вычислить $f''(x)$:

$$f''(x) = \begin{cases} \frac{1}{4\sigma} \left(\frac{\sigma}{d} e^{(|x|+1)\sqrt{\sigma/d}} - \frac{\sigma}{d} e^{(|x|-1)\sqrt{\sigma/d}} \right), & |x| \geq 1, \\ \frac{1}{4\sigma} \left(-\frac{\sigma}{d} e^{(|x|-1)\sqrt{\sigma/d}} - \frac{\sigma}{d} e^{-(|x|+1)\sqrt{\sigma/d}} \right), & |x| < 1. \end{cases}$$

Для удобства, найдём отношение f'' к f

$$\frac{f''}{f} = \begin{cases} \frac{\sigma}{d}, & |x| \geq 1, \\ \frac{\sigma}{d} - \frac{2\sigma}{fd}, & |x| < 1. \end{cases}$$

Матричный элемент L_{ij} принимает вид:

$$\begin{aligned} L_{ij} &= (f_i, L f_j) = \int_{-\infty}^{\infty} f_i L f_j dx = \int_{-\infty}^{\infty} f_i \left(-d \frac{d^2}{dx^2} + \sigma \right) f_j dx = \\ &= \left(\sigma - d \frac{\sigma_j}{d_j} \right) \int_{-\infty}^{\infty} f_i f_j dx + \frac{d}{d_j} \int_{-1}^1 f_i dx = \left(\sigma - d \frac{\sigma_j}{d_j} \right) J_{ij} + \frac{d}{d_j} J_i, \end{aligned}$$

где $J_{ij} = \int_{-\infty}^{\infty} f_i f_j dx$ — интеграл, используемый для вычисления матричного элемента, который имеет вид

$$J_{ij} = \begin{cases} \frac{d_i J_i - d_j J_j}{d_i \sigma_j - d_j \sigma_i}, & i \neq j, \\ \frac{3 J_i}{2 \sigma_i} - \frac{1 - e^{-2\sqrt{\sigma_i/d_i}}}{4 \sigma_i}, & i = j. \end{cases}$$

Таким образом, матричный элемент L_{ij} принимает вид:

$$\begin{aligned} L_{ij} &= \frac{d}{d_j} (\sigma_i J_{ij} + J_i) + \sigma J_{ij}, \\ J_{ij} &= \begin{cases} \frac{d_i J_i - d_j J_j}{d_i \sigma_j - d_j \sigma_i}, & i \neq j, \\ \frac{3 J_i}{2 \sigma_i} - \frac{1 - e^{-2\sqrt{\sigma_i/d_i}}}{4 \sigma_i}, & i = j. \end{cases} \end{aligned}$$

Линейная зависимость матричных элементов L_{ij} от σ и d приводит к дробно-полиномиальной форме представления зависимости искомого функционала от σ и d , что обычно позволяет получить лучшую точность, чем аппроксимация степенным рядом. Например, в рассматриваемом случае вдоль линии $\sigma/d = \text{const}$ достаточно одной опорной точки, чтобы выражение J_i^2/L_{11} точно соответствовало искомому функционалу.

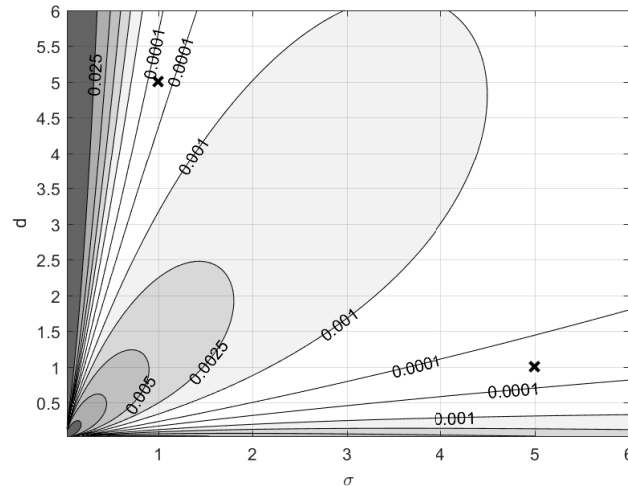


Рис. 2: Погрешность измерений $\varepsilon = \tilde{J} - J$ для опорных точек $(\sigma = 5, d = 1)$ и $(\sigma = 1, d = 5)$. Крестиками здесь и ниже отмечены опорные точки.

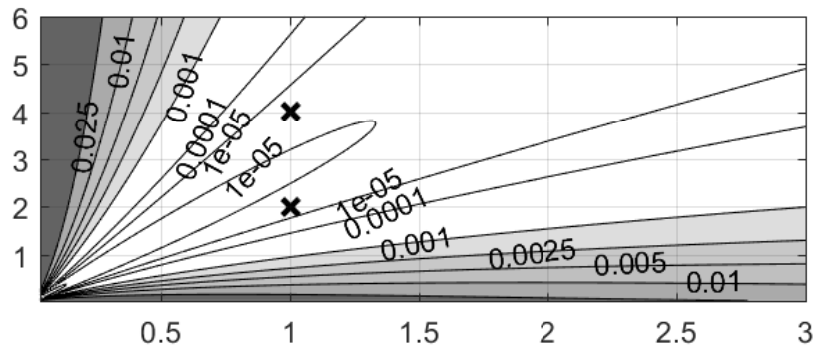


Рис. 3: Погрешность интерполяции $\varepsilon = \tilde{J} - J$ для опорных точек $(\sigma = 1, d = 2)$ и $(\sigma = 1, d = 4)$.

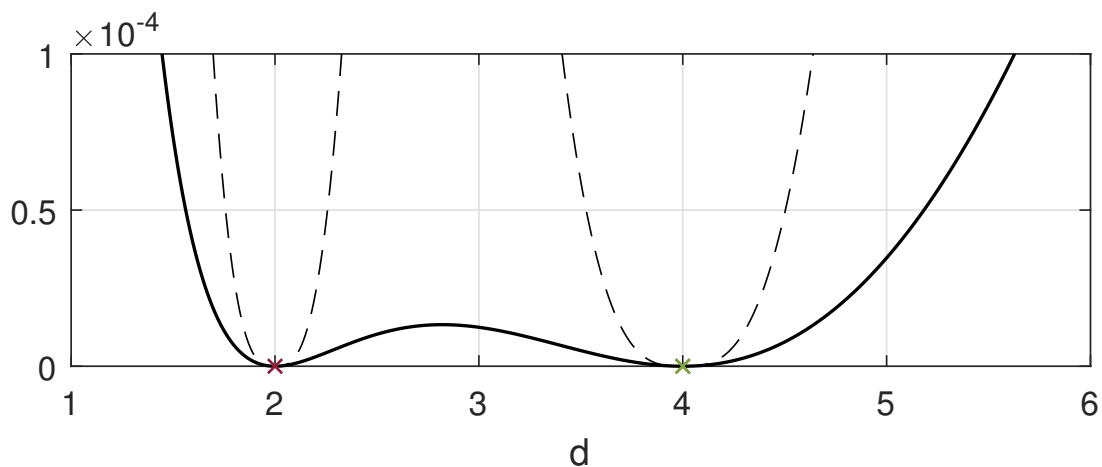


Рис. 4: Погрешность интерполяции $\varepsilon = \tilde{J} - J$ для опорных точек $(\sigma = 1, d = 2)$ и $(\sigma = 1, d = 4)$ вдоль оси d при $\sigma = 1$. Штриховой линией показана погрешность второго приближения теории возмущений.

На рис. 2 представлена топограмма интерполяционной погрешности $\varepsilon = \tilde{J} - J$ в случае применения двух опорных операторов с несовпадающими параметрами $(\sigma = 5, d = 1)$ и $(\sigma = 1, d = 5)$. В некоторой окрестности прямых, проходящих через начало координат и опорные точки, аппроксимация оказывается очень точной. Наибольшая погрешность наблюдается, когда хотя бы одна из координат стремится к 0, а также в области между опорными точками. На двух следующих (3 и 4) рисунках приведены результаты расчёта погрешности в случае однопараметрической интерполяции, когда один из параметров двухпараметрической модели совпадает.

4 Заключение

В работе продемонстрировано применение вариационного метода интерполирования к одномерной диффузионной задаче и показана его высокая эффективность. Сложная топография поля погрешностей в многопараметрических задачах (на примере рассмотренной в статье двухпараметрической задачи) указывает на серьёзность проблемы выделения областей повышенной эффективности метода и необходимость разработки методики её определения. Это особенно важно в связи с интенсивным развитием теории решения обратных задач в свете предложенных 40 лет тому назад идей Г.И. Марчука [6]. Необходимо также отметить, что в рассматриваемом примере оператор L был функцией двух переменных, тогда как в более общем (и интересном) случае он может быть функционалом от функций, характеризующих зависимость свойств среды от координат, при этом формальная структура данного метода сохраняется без изменений.

Список литературы

- [1] Марчук Г. И., Орлов В. В. К теории сопряжённых функций // Сб. Нейтронная физика. М.: Госатомиздат, 1961. С.30–45.
- [2] Усачев Л.Н., Уравнения для ценности нейтронов, кинетика реакторов и теория возмущений // Реактостроение и теория реакторов. М.: Изд-во АН СССР, 1955. С. 251
- [3] Шихов С.Б., Шишков Л.К. Теория возмущений высших порядков для решения некоторых задач расчёта реакторов. // Теория и физика реакторов. Сб. статей. Под ред. Л.Н. Юровой. М., Атомиздат, 1967, С. 3–29.
- [4] Учайкин В. В. Метод вариационного интерполирования в ядерно-технических расчётах // М.: Атомная энергия. 1989. Том 61, Вып. 1. С. 54–55.
- [5] Кольчужкин А.М., Учайкин В. В. Введение в теорию прохождения частиц через вещество // М.: Атомиздат, 1978.
- [6] Марчук Г.И., Методы вычислительной математики//М.: Физматлит, Наука, 1977.

*Владимир Васильевич Учайкин — д.ф.-м.н., заведующий кафедрой теоретической физики;
Ульяновский государственный университет;
e-mail: vuchaikin@gmail.com;*

*Владимир Андреевич Литвинов — начальник кафедры информатики и специальной техники;
Барнаульский юридический институт МВД России;
e-mail: lva201011@yandex.ru;*

*Елена Владиславовна Кожемякина — старший преподаватель кафедры теоретической физики;
Ульяновский государственный университет;
e-mail: elvk@mail.ru;*

*Илья Игоревич Кожемякин, магистрант кафедры информационных технологий;
Ульяновский государственный университет;
e-mail: kozhilya@gmail.com.*

Дата поступления — 31 мая 2017 г.