УДК 519.8

Н.С. Бузало, А.Н. Никифоров

СОПРЯЖЕННЫЕ УРАВНЕНИЯ В ЗАДАЧАХ УПРАВЛЕНИЯ КОНЦЕНТРАЦИЕЙ НЕКОНСЕРВАТИВНОЙ ПРИМЕСИ*

Рассматриваются задачи об оптимальном управлении мощностями источников загрязняющих примесей в водное русло. Приведены постановки задач оптимального управления и алгоритмы их численного решения, основанные на использовании сопряженных уравнений. Рассмотрены две модели: для консервативной примеси и для системы неконсервативных примесей. Достоинством первой линейной математической модели является приемлемая вычислительная сложность, практически без ограничения на сложность описания гидродинамики водоема и переноса примесей. Для второй нелинейной задачи, основанной на квазилинейной системе уравнений реакции-конвекции-диффузии, предложен итерационный алгоритм решения на основе метода проекции градиента.

Оптимальное управление; сопряженные уравнения; система уравнений реакции-конвекции-диффузии.

N.S. Buzalo, A.N. Nikiforov

ADJOINT EQUATIONS IN CONTROL PROBLEMS OF NON-CONSERVATIVE ADMIXTURE CONCENTRATION

This paper considers the problem of optimal control of water pollution sources in the water courses. We give statement of the optimal control problems and algorithms based on the use of adjoint equations for their numerical solution. Two problems are considered: the regulation of constant in time pointwise sources of conservative impurities, and also control of pollutant discharges for case system of non-conservative substances. The advantage of the first linear mathematical model is a reasonable computational complexity, almost without restrictions on the complexity of the description of the fluid dynamics and transport of pollutants. For the second nonlinear problem, an iterative solution algorithm based on the gradient projection method based on the quasi-linear system of reaction-convection-diffusion equation is given

Optimal control; adjoint equations; the system of reaction-convection-diffusion equation.

Введение. Одной из подзадач в проблеме управления объемом и качеством воды в водоемах, приведенных в [1], является вопрос регулирования нормативов допустимых и временно согласованных сбросов загрязняющих веществ в речные русла. Для решения задачи оптимального управления мощностями источников сбросов загрязняющих веществ в водное русло будем использовать сопряженные уравнения переноса. Рассмотрим две задачи: регулирование мощностей постоянных по времени точечных сбросов для консервативной примеси и регулирование мощностей точечных сбросов для некоторой совокупности неконсервативных примесей. Распространение консервативной примеси описывается начально-краевой задачей для линейного параболического уравнения реакции-конвекции-диффузии, для неконсервативных примесей – системой квазилинейных уравнений реакции-конвекции-диффузии, которая, в частности, может описывать динамику водной экосистемы. В первом случае, благодаря линейности и особому виду управлений, задача может быть легко сведена к задаче линейной оптимизации. К сожалению, нелинейность прямой постановки для совокуп-

* Работа выполнена при поддержке совместной программы «Михаил Ломоносов» Министерства образования и науки РФ и DAAD: научно-исследовательские стипендии и научные стажировки (Michail-Lomonosov-Forschungsstipendien und -aufenthalte).

ности неконсервативных примесей требует решения нелинейной оптимизационной задачи. Для обеих постановок возникает необходимость согласованного решения прямой и сопряженной задач.

Постановка задач. В случае ***единственной примеси*** переменной состояния является осредненная по площади сечения русла концентрация примеси *с*.

Параметры управления: $\overline{f}_i \quad i = 1, ..., M$ - мощности точечных источников загрязняющей примеси.

Целевой функционал: минимизация совокупных затрат всех водопотребителей (случай коалиции предприятий)

$$\min \quad J = \sum_{i=1}^{M} \xi_i (f_i - \overline{f_i}) + K_z \sum_{i=1}^{M} H(\overline{f_i}) , \tag{1}$$

где f_i – текущие мощности сбросов (до регулирования); ξ_i – стоимость улучшения технологии на единицу мощности; $K_z \sum_{i=1}^{M} H(\overline{f_i})$ – слагаемое, описывающее затраты на плату за сброс.

Ограничения на управления:

- стоимость улучшения технологий не превышает заданных величин Ψ_i ;
- технологические ограничения, определяемые некоторым коэффициентом максимально возможного улучшения технологии α_i ;
- сумма с сбросов в водный объект не превышает лимита установленного государством $f_{\text{limitations}}$.

$$\xi_i (f_i - \overline{f_i}) \le \Psi_i , \quad \alpha_i f_i \le \overline{f_i} \le f_i , \quad i = 1, 2, ... M , \quad \sum_{i=1}^{M} \overline{f}_i \le f_{\text{limitations}} . \tag{2}$$

Ограничения на переменную состояния: ущерб от качества воды не должен быть более некоторого заданного значения Θ_j в зонах водозабора:

$$\varphi_j \left\langle p_j , c - c_{PDK_j} \right\rangle \le \Theta_j , \; j = 1, 2, ... K , \tag{3}$$

где φ_j – коэффициент стоимости ущерба от превышения концентрацией значения c_{PDK_i} ; p_j – функция равная единице в зонах водозабора и нулю вне этих зон; $\left\langle g , h \right\rangle = \int_{\Omega_T} g(\mathrm{x}, t) h(\mathrm{x}, t) d\,\mathrm{x}\, dt$, $\forall g, h \in L^2(\Omega_T)$.

Уравнения состояния:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial (uc)}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x}\left(k \frac{\partial c}{\partial x} \right) + \sigma c = \sum_{i=1}^{M_1} P_i \overline{f_i} + q_\Omega , \; x \in \Omega, \quad t \in (0, T] ; \tag{4}$$

$$c = c_\Sigma(t), \quad x \in \partial\Omega, \quad t \in (0, T] ; \tag{5}$$

$$c(x, 0) = \Phi(x) , \; x \in \Omega , \tag{6}$$

где P_j – функция, равная единице в зонах сброса примеси и нулю вне этих зон; q_Ω – слагаемое, описывающее неконтролируемые источники; c_Σ и Φ – заданные функции; u , k , σ – осредненные по сечению русла скорость течения, коэффициент диффузии и скорость химической трансформации.

Совокупность неконсервативных примесей. Рассматривается несколько субстанций, взаимодействующих друг с другом, концентрация которых должна быть ограничена в некоторых значимых зонах (например, это могут быть некоторые биогены водной экосистемы: фосфор, азот, живое и мертвое растворенное органическое вещество, кислород, и т.д. [2, 3]). Тогда c – это вектор концентрации этих веществ $c=(c_1, c_2, ..., c_R)$, и ограничения на переменную состояния и уравнения состояния тоже имеют векторный вид.

Целевой функционал запишем в виде

$$\min \quad J=\sum_{i=1}^{R}\left(\sum_{j=1}^{M_i}\left(\xi_{ij}(f_{ij}-\overline{f_{ij}})+K_z H(\overline{f_{ij}})\right)\right)+\langle p,c\rangle, \tag{7}$$

где M_i – число источников i-й примеси, $p=(p_1, p_{2,} ..., p_R)$ – вектор-функция, компоненты которой равны единице в тех подмножествах Ω, в которых контролируется количество i-й примеси, и нулю вне этих зон.

Кроме того, уравнение (4) необходимо заменить нелинейной системой уравнений вида

$$\frac{\partial c_i}{\partial t}+\frac{\partial(uc_i)}{\partial x}-\frac{\partial}{\partial x}\left(k\frac{\partial c_i}{\partial x}\right)+B_i(c_1, c_2, ..., c_R)=\sum_{j=1}^{M_i}P_{ij}\overline{f_{ij}}+q_{\Omega i},$$

$$x\in\Omega,\ t\in(0,T],\ i=1,2,...,R, \tag{8}$$

где $B_i(c_1, c_2, ..., c_R)$ – описывают процессы биохимической трансформации субстанций.

Алгоритм решения задачи управления.

1. Сведение к задаче линейной задачи оптимизации (4)–(6). Используя подход, описанный в [4], представим решение как суперпозицию решения задач от независимых источников

$$c=\sum_{i=1}^{M}\overline{f}_i c_i+c_0, \tag{9}$$

где c_i, $i=1,2,...M$ – решение следующих задач

$$\frac{\partial c_i}{\partial t}+\frac{\partial(uc_i)}{\partial x}-div(k\ grad(c_i))+\sigma c_i=P_i,\ \mathrm{x}\in\Omega,\quad t\in[0,T]; \tag{10}$$

$$c=0,\quad x\in\partial\Omega,\quad t\in(0,T]; \tag{11}$$

$$c_i(x,0)=0,\ \mathrm{x}\in\Omega. \tag{12}$$

Аналогичным образом вводится функция c_0, являющаяся решением начально-краевой задачи с неоднородными граничными и начальными условиями (5), (6) и источниковыми членами, соответствующими неконтролируемым источникам загрязняющего вещества.

Тогда ограничения (3) имеют вид

$$\varphi_j\left(\left\langle p_j, \sum_{i=1}^{M}\overline{f}_i c_i+c_0-c_{PDK}\right\rangle\right)\le\Theta_j. \tag{13}$$

Запишем (4)–(6) в операторном виде $Ac=F$, и каждому ограничению (13) поставим в соответствие сопряженное уравнение

$$A^* c_j^*=p_j,\ j=1,2,...K, \tag{14}$$

где A^* – сопряженный оператор, определяемый тождеством Лагранжа $\langle Ah, g\rangle = \langle h, A^* g\rangle$, использование которого необходимо, чтобы обеспечить $\langle P_i, c_j^*\rangle = \langle p_j, c_i\rangle$:

$$\langle Ac_i, c_j^*\rangle = \langle c_i, A^* c_j^*\rangle = \langle P_i, c_j^*\rangle \text{ и } \langle A^* c_j^*, c_i\rangle = \langle c_j^*, Ac_i\rangle = \langle p_j, c_i\rangle,\ \langle P_i, c_j^*\rangle = \langle p_j, c_i\rangle,$$

$$i = 1,2,...M,\ \ j = 1,2,...K.$$

Таким образом, ограничение (13) приходит к форме

$$\sum_{i=1}^{M} \varphi_j \left(a_{ij}^* \overline{f_i} + \left\langle p_j, \tilde{n}_0 - c_{PDK\ j} \right\rangle \right) \le \Theta_j,\ j = 1,2,...,K, \tag{15}$$

где

$$a_{ij}^* = \int\limits_{\Omega_T} P_i c_j^* d\Omega_T,\ i = 1,2,...M,\ j = 1,2,...K, \tag{16}$$

где c_j^* – решение следующей сопряженной задачи:

$$-\frac{\partial c_j^*}{\partial t} - \frac{\partial (u c_j^*)}{\partial x} - div(k\ grad(c_j^*)) + \sigma c_j^* = p_j,\quad (\mathrm{x}, t) \in \Omega_T; \tag{17}$$

$$c_j^* = 0,\ \ j = 1,2,...,K,\ \ x \in \partial\Omega,\ \ t \in (0,T]; \tag{18}$$

$$c_j^*(x,T) = 0,\ \ j = 1,2,...,K,\ \ x \in \Omega. \tag{19}$$

Таким образом, получаем задачу линейной оптимизации (1), (2), (15)–(19), достоинством которой является приемлемая вычислительная сложность, практически без ограничения на сложность описания процесса переноса примесей. Еще одним удобством подхода является то, что однажды выполнив затратные расчеты значений матрицы (16) для некоторого заданного периода времени и гидрологической ситуации, можно затем сколь угодно раз решать простые (с вычислительной точки зрения) оптимизационные задачи с любыми комбинациями ограничений, сформулированных из экономических соображений или из каких-либо других. Также возможна формулировка задач в виде многокритериальных или игровых. Алгоритм может быть использован и в случае, если в систему уравнений, описывающих перенос примеси включена линеаризованная система уравнений водной экосистемы, т.е. система уравнений, полученная путем линеаризации уравнений (8).

2. *Итерационное решение задачи управления концентрацией неконсервативных примесей.* Рассмотрим случай, когда нельзя пренебречь нелинейностью процессов биохимического взаимодействия веществ. Здесь будем ориентироваться на какой-либо градиентный метод решения задачи оптимизации с проекцией градиента на множество допустимых решений. Для этого получим выражение для градиента функционала J, используя вариацию Лагранжиана и сопряженную систему [5]. Обозначим $U = (c_1, c_2, ..., c_R)$ – вектор неизвестных функций, а $\varphi = \left(\overline{f_{ij}}\right)$, $i = 1,2,..., R$, $j = 1,2,..., M_i$ – управления.

Запишем прямую задачу в операторном виде

$$AU = \varphi \text{ в } \Omega_T. \tag{20}$$

Введем сопряженные параметры $\psi = (\psi_1, \psi_2, ..., \psi_R)$ и Лагранжиан

$$L = J + \langle AU - \varphi, \psi \rangle . \tag{21}$$

Можно показать, что вариация целевого функционала ΔY равна вариации Лагранжиана ΔL на решении прямой задачи и задачи в возмущениях.

Вычисляя производную Гато и используя тождество Лагранжа, получаем, что вариация Лагранжиана под действием возмущения имеет вид

$$\Delta J = \Delta L = -\langle \Delta\varphi, \psi \rangle . \tag{22}$$

В результате, решив сопряженную задачу и вычислив Ψ, получаем градиент целевого функционала $\nabla J = \nabla J(\varphi) = \psi(U(\varphi))$ и можем рассчитать новое приближение $\varphi^{j+1} = \varphi^j - \tau\nabla J$.

Действуя аналогично [6, 7], запишем исходную задачу нелинейной оптимизации в виде

$$\min\ J(c(\varphi),\ \varphi) \equiv J(\varphi), \quad E(c(\varphi),\ \varphi) = 0, \quad \varphi \in \Phi_{ad} \equiv \{(c,\ \varphi) \in W_{ad}\},$$

где W_{ad} – множество допустимых решений и управлений; Φ_{ad} – редуцированное множество допустимых управлений.

Если уравнения состояния дифференцируемы по Фреше, то

$$E'_c(c(\varphi),\ \varphi)c'(\varphi) + E'_\varphi(c(\varphi),\ \varphi) = 0 .$$

Лагранжиан L запишется в следующем виде:

$$J(\varphi) = J(c(\varphi), \varphi) = J(c(\varphi), \varphi) + \langle \psi,\ E(c(\varphi), \varphi) \rangle = L(c(\varphi), \varphi, \psi) .$$

Дифференцируя это выражение и умножая на возмущение управления, получаем

$$\langle J'(\varphi), \Delta\varphi \rangle = \langle L'_c(c(\varphi), \varphi, \psi),\ c(\varphi)\Delta\varphi \rangle + \langle L'_\varphi(c(\varphi), \varphi, \psi),\ \Delta\varphi \rangle .$$

Выберем специальным образом вектор сопряженных функций ψ так, чтобы выполнялось равенство

$$L'_c(c(\varphi), \varphi, \psi) = 0 .$$

Так как

$$\langle L'_c(c(\varphi), \varphi, \psi), d \rangle = \langle J'_c(c, \varphi), d \rangle + \langle \psi, E'_c(c, \varphi)d \rangle = \langle J'_c(c, \varphi) + E'_c(c, \varphi)^* \psi, d \rangle ,$$

то

$$L'_c(c(\varphi), \varphi, \psi) = J'_c(c, \varphi) + E'_c(c, \varphi)^* \psi = J'_c(c, \varphi) + \langle \psi, E'_c(c, \varphi) \rangle .$$

Таким образом, сопряженное уравнение имеет вид

$$E'_c(c(\varphi), \varphi)^* \psi = J'_c(c(\varphi), \varphi) ,$$

где $E'_c(c, \varphi)$ – оператор касательной задачи (задачи для приращений); $E'_c(c, \varphi)^*$ – спряженный к нему определяемый из тождества Лагранжа. Для поставленной задачи

$$E'_c(c, \varphi)\Delta c = \begin{cases} \dfrac{\partial \Delta c_i}{\partial t} + \dfrac{\partial(u\Delta c_i)}{\partial x} - \dfrac{\partial}{\partial x}\left(k\dfrac{\partial \Delta c_i}{\partial x}\right) + \sum\limits_{i=1}^{R} \dfrac{\partial B_i}{\partial c_i}\Delta c_i, \ i = 1, ..., R, \ x \in \Omega, \ t \in (0, T], \\ \Delta c_i, \quad i = 1, ..., R, \quad x \in \partial\Omega, \quad t \in (0, T], \\ \Delta c_i(x, 0), \quad i = 1, ..., R, \quad x \in \Omega; \end{cases} \tag{23}$$

$$E'_c(c,\varphi)^*\psi = \begin{cases} -\dfrac{\partial\psi_i}{\partial t} - \dfrac{\partial(u\psi_i)}{\partial x} - \dfrac{\partial}{\partial x}\left(k\dfrac{\partial\psi_i}{\partial x}\right) + \sum\limits_{i=1}^{R}\dfrac{\partial B_i}{\partial c_i}\psi_i,\ i=1,...,R,\ x\in\Omega,\ t\in[0,T), \\ \psi_i,\quad i=1,...,R,\quad x\in\partial\Omega,\quad t\in[0,T), \\ \psi_i(x,T),\quad i=1,...,R,\quad x\in\Omega; \end{cases} \quad (24)$$

$$J'_c(c,\varphi) = \begin{cases} p_i,\ i=1,2,...,R, \\ 0, \\ ... \\ 0. \end{cases} \quad (25)$$

Вариация Лагранжиана равна $\left\langle J'(\varphi),\Delta\varphi\right\rangle = \left\langle L'_\varphi(c(\varphi),\varphi,\psi),\Delta\varphi\right\rangle$. Аналогично предыдущему

$$\left\langle L'_\varphi(c(\varphi),\varphi,\psi),d\right\rangle = \left\langle J'_\varphi(c,\varphi),d\right\rangle + \left\langle \psi, E'_\varphi(c,\varphi)d\right\rangle,$$

$$J'(\varphi) = J'_\varphi(c(\varphi),\varphi) + \left\langle \psi(\varphi), E'_\varphi(c,\varphi)\cdot\right\rangle = J'_\varphi(c(\varphi),\varphi) + E'_\varphi(c(\varphi),\varphi)^*\psi(\varphi).$$

Таким образом, градиент целевого функционала равен

$$\nabla J = \left(-\xi_{ij} + K_z\frac{\partial H}{\partial \overline{f_{ij}}} - \left\langle \psi_i, P_{ij}\right\rangle\right)_{\substack{i=1,2,...,R \\ j=1,2,...,M_i}}. \quad (26)$$

Вариационные неравенства. Для того чтобы выпуклый функционал достигал своего минимума на множестве Φ_{ad} в точке φ^*, необходимо и достаточно, чтобы

$$\left\langle J'(\varphi^*),\varphi-\varphi^*\right\rangle \geq 0 \text{ при всех } \varphi^*\in\Phi_{ad},$$

таким образом, для оптимальности φ^* необходимо и достаточно, чтобы

$$\overline{f_{ij}}^*:\ \left(\overline{f_{ij}} - \overline{f_{ij}}^*\right)\left(-\xi_{ij} + K_z\frac{\partial H}{\partial \overline{f_{ij}}} - \left\langle \psi_i, P_{ij}\right\rangle\right) \geq 0. \quad (27)$$

Минимизация функционала качества может осуществляться различными методами [8–10]. Одними из наиболее удобных являются различные варианты метода проекции градиента. С учетом (26) следующее итерационное приближение φ вычисляется по формуле

$$\varphi^{k+1} = P_S\left(\varphi^k - \tau\left(-\xi_{ij} + K_z\frac{\partial H}{\partial \overline{f_{ij}}} - \left\langle \psi_i^k, P_{ij}\right\rangle\right)\right),$$

где P_S – оператор проектирования на множество Φ_{ad} строится на основе (27), а проекционный шаг τ – выбирается так, чтобы

$$J\left(P_S\left(\varphi^k - \tau\left(-\xi_{ij} + K_z\frac{\partial H}{\partial \overline{f_{ij}}} - \left\langle \psi_i^k, P_{ij}\right\rangle\right)\right)\right) < J_k(\varphi^k).$$

Выводы. Сформулированы постановки и алгоритмы решения задач управления источниками загрязняющих веществ в водное русло. Предложена модель для установки режима сбросов, которая позволяет одновременно учитывать: экономические показатели (затраты на плату за сброс ЗВ, включая штрафы и затраты на природоохранные мероприятия; максимально возможные ущербы от использования загрязненной воды для предприятий; максимально допустимые затраты на водоохранные мероприятия; затраты на улучшение качества воды до нормы, соответствующей технологическим процессам предприятий), а также гидрологический режим водоема и химические характеристики примесей ЗВ.

Рассмотрены две модели: для консервативной примеси и для системы неконсервативных примесей. Достоинством первой математической модели является приемлемая вычислительная сложность, практически без ограничения на сложность описания гидродинамики водоема и переноса примесей. Удобством метода является также то, что однажды выполнив затратные расчеты значений матрицы (16) для некоторого заданного периода времени и гидрологической ситуации, можно затем сколь угодно раз решать простые (с вычислительной точки зрения) оптимизационные задачи с любыми комбинациями ограничений, сформулированных из экономических соображений или из каких-либо других. Также возможна формулировка задач в виде многокритериальных или игровых. Алгоритм может быть использован и в случае, если в систему уравнений, описывающих перенос примеси, включена линеаризованная система уравнений, описывающих перенос неконсервативной примеси.

Для второй нелинейной задачи, основанной на квазилинейной системе уравнений реакции-конвекции-диффузии, предложен итерационный алгоритм решения на основе метода проекции градиента с использованием сопряженной системы уравнений.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. *Бузало Н.С., Никифоров А.Н.* Использование сопряженных уравнений в задачах управления объемом и качеством воды в водоемах // Известия ЮФУ. Технические науки. – 2012. – № 6 (131). – С. 36-41.
2. *Астраханцев Г.П., Меншуткин В.В., Петрова Н.А., Руховец Л.А.* Моделирование экосистем больших стратифицированных озер. – СПб.: Наука, 2002.
3. *Меншуткин В.В.* Искусство моделирования (экология, физиология, эволюция) – Петрозаводск – Санкт-Петербург: Санкт-Петербургский экономико-математический институт, 2010.
4. *Марчук Г.И.* Сопряженные уравнения и анализ сложных систем. – М.: Наука: Гл. ред. физ.-мат. лит., 1992.
5. *Алексеев А.К., Бондарев А.Е.* Применение сопряженных уравнений и визуальное представление сопряженных параметров в задачах идентификации и управления течением // Препринты ИМП им. М.В. Кельдыша. – 2011. – № 50. – 24 с. URL: http://library.keldysh.ru/ preprint.asp?id=2011-50.
6. *Hinze M., Pinnau R., Ulbrich M., and Ulbrich S.* Optimization with PDE Constraints . Springer, 2009.
7. *Simon M., Ulbrich M.* Optimal Control of Partially Miscible Two-Phase Flow with Applications to Subsurface CO_2 Sequestration, Preprint, Munich, 2012 http://www-m1.ma.tum.de/foswiki/pub/M1/Lehrstuhl/PublikationenUlbrich/SimonUlbrich12.pdf.
8. *Васильев Ф.П.* Методы оптимизации. – М.: Факториал Пресс, 2002.
9. *Сеа Ж.* Оптимизация. Теория и алгоритмы. – М.: Мир, 1973.
10. *Полак Э.* Численные методы оптимизации. Единый подход. – М.: Мир, 1974.

Статью рекомендовал к опубликованию д.т.н., профессор А.Н. Ткачев.

Бузало Наталья Сергеевна – Южно-Российский государственный технический университет (Новочеркасский политехнический институт); e-mail: buzalo.n.s@mail.ru; 346428, Россия, г. Новочеркасск, ул. Просвещения, 132; тел.: 89185324924; физико-математический факультет; кафедра «Прикладная математика»; доцент.

Никифоров Александр Николаевич – e-mail: a.n.nikiforov@mail.ru; тел.: 88635255692; физико-математический факультет; кафедра «Прикладная математика»; профессор.

Buzalo Natalya Sergeevna – South-Russian state technical university (Novocherkassk polytechnic institute); e-mail: buzalo.n.s@mail.ru; 132, Prosvesheniya street, Novocherkassk, 346428, Russia; phone: +79185324924; faculty of mathematics and physics; the department of applied mathematics; associate professor.

Nikiforov Alexandr Nikolaevich – e-mail: a.n.nikiforov@mail.ru; phone: +78635255695; faculty of mathematics and physics; the department of applied mathematics; professor.