УДК: 519.6

А.В. Елесин, А.Ш. Кадырова, П.А. Мазуров
Институт механики и машиностроения Казанского научного центра РАН, Казань
mazurov@mail.knc.ru

ДВУХШАГОВЫЕ МЕТОДЫ ЛЕВЕНБЕРГА-МАРКВАРДТА В ЗАДАЧЕ ИДЕНТИФИКАЦИИ КОЭФФИЦИЕНТА ФИЛЬТРАЦИИ

Предложен двухшаговый метод Левенберга-Марквардта минимизации функции невязки. На примере решения модельной задачи идентификации коэффициента фильтрации трёхмерного анизотропного водоносного пласта проведено сравнение классического и двухшагового методов Левенберга-Марквардта. Численные результаты показали эффективность предложенного метода.

Ключевые слова: математическое моделирование, минимизация функции невязки, идентификация коэффициента фильтрации.

Постановка задачи идентификации коэффициента фильтрации. Рассматривается модельная задача идентификации коэффициента фильтрации трёхмерного анизотропного напорного водоносного пласта Щпо замерам напора в наблюдательных точках в условиях однофазной стационарной фильтрации жидкости, описываемой уравнением (Мироненко, 1996)

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(K_{xy}\frac{\partial h}{\partial x}\right)+\frac{\partial}{\partial y}\left(K_{xy}\frac{\partial h}{\partial y}\right)+\frac{\partial}{\partial z}\left(K_{z}\frac{\partial h}{\partial z}\right)=0, \qquad (1)$$

где K_{xy}, K_z – коэффициенты фильтрации, $h = h(x,y,z)$ – напор. Пласт Щпятислойный (≈40 км×30 км×200м), слои зонально-неоднородные, $\Omega=\bigcup_{k=1}^{71}\Omega_k$. Каждая зона однородности $Щ_k$ характеризуется двумя значениями коэффициента фильтрации K_{xyk}^{tr}, K_{zk}^{tr}. Значения коэффициента фильтрации K_{xyk}^{tr} брались в пределах от 0.1 м·сут$^{-1}$ до 100 м·сут$^{-1}$, K_{zk}^{tr} в пределах от 0.0001 м·сут$^{-1}$ до 0.02 м·сут$^{-1}$. На кровле пласта заданы граничные условия 2-го рода (от –9.2·10^{-3} м·сут$^{-1}$ до 2·10^{-3} м·сут$^{-1}$), которые моделируют инфильтрацию, расходные характеристики родников и реки. Подошва и боковая поверхность непроницаемы, за исключением участка боковой поверхности 5-го слоя, на котором заданы граничные условия 1-го рода h = 80 м. Для дискретизации уравнения (1) использовался метод конечных элементов. Полученная в результате дискретизации система линейных алгебраических уравнений решалась методом

метод	Начальное состояние		конечное состояние			
	$h_{\max}$	$\Delta\ln K_{xyz}^{0}$	$h_{\max}$	$\Delta\ln K_{xyz}^{st}$	*it*	*nc*
ЛМ	9.27	1.7	3×10^{-5}	0.71	222**	31934
ДЛМ			9×10^{-7}	0.17	108	15645
ДЛММ			8×10^{-7}	0.16	57	8437

*Табл. 1. ЛМ – метод Левенберга-Марквардта; ДЛМ – двухшаговый метод Левенберга-Марквардта, ДЛММ – модифицированный двухшаговый метод Левенберга-Марквардта; h_{max} – максимальная невязка, $\Delta\ln K_{xyz}^{0}$, $\Delta\ln K_{xyz}^{st}$ – начальные и итоговые значения среднеквадратического отклонения, it – число итераций, nc – число, характеризующее вычислительные затраты, ** – процесс минимизации остановлен по критерию медленной сходимости.*

сопряженных градиентов с предобусловливающей матрицей в виде неполного разложения Холесского (Hill, 1990).

Из решения уравнения (1) при заданных значениях коэффициента фильтрации K_{xyk}^{tr}, K_{zk}^{tr} определялись значения напора в наблюдательных точках h_j^{tr} (j=1,…,247). Наблюдательные точки располагались на кровле пласта.

По значениям $h_j^{*}=h_j^{tr}+\delta_j$, где δ_j – задаваемая погрешность, восстанавливались логарифмы значений коэффициента фильтрации $K=\{K_i\}_{i=1}^{142}=\{\ln K_{xyk},\ln K_{zk}\}_{k=1}^{71}$ из минимума функции невязки

$$J(K)=\frac{1}{2}R^{T}R=\frac{1}{2}\sum_{j=1}^{247}\left(h_j-h_j^{*}\right)^2, \qquad (2)$$

где $R=(h_1-h_1^{*},...,h_{247}-h_{247}^{*})$ – вектор невязок, $h_j = h_j(K)$ – вычисленные значения напора в наблюдательных точках. В процессе идентификации параметры K_{xyk}^{tr}, K_{zk}^{tr} считались неизвестными.

Двухшаговый метод Левенберга-Марквардта. Одной из причин плохой эффективности методов минимизации функции невязки является сильная овражность минимизируемой функции. Для минимизации таких функций широко используются различные варианты метода Левенберга-Марквардта. В методе Левенберга-Марквардта новые значения параметров на каждой итерации определяются по формуле

$$K^{n} = K^{n-1} - (H + \mu_n E)^{-1} g,$$

где E – единичная матрица, $H = A^TA$ – приближённая матрица вторых производных, $A=\left\{\frac{\partial h_j}{\partial K_i}\right\}$ – матрица чувствительности, g – градиент функции невязки, μ_n – параметр Марквардта, n – номер итерации. При больших значениях m_n направление спуска метода Левенберга-Марквардта близко к направлению метода наискорейшего спуска, при малых значениях μ_n близко к направлению метода Гаусса-Ньютона. Различные варианты метода Левенберга-Марквардта отличаются стратегией выбора на каждой итерации параметра Марквардта (Дэннис, 1988; Hill, 1998; Sun, 1994). В статье (Мазуров и др., 2009) построен двухшаговый метод на основе метода Левенберга-Марквардта, в котором параметр Марквардта определялся методом золотого сечения из минимума функции невязки $\min\limits_{\mu_n} J(K^{n-1} - (H + \mu_n E)^{-1} g)$. В предлагаемом двухшаговом методе Левенберга-Марквардта (ДЛМ) используется следующая стратегия выбора параметра Марквардта (Пантелеев, Летова, 2005). Начальное значение параметра Марквардта выбирается на порядок больше максимального сингулярного числа матрицы H. В случае уменьшения функции невязки на текущей итерации $J(K^n) < J(K^{n-1})$ параметр Марквардта уменьшается в два раза, в случае нарушения условия убывания параметр Марквардта увеличивается в два раза до тех пор, пока это условие не выполнится. При построении двухшагового алгоритма используется главная система координат, полученная с помощью сингулярного разложения $H=V\Sigma V^T$, где V – ортогональная матрица, $\Sigma=(\sigma_1,...,\sigma_{142})$ - диагональная матрица, σ_i – сингулярные числа, $\sigma_1 \geq \sigma_2 ... \geq \sigma_{142} \geq 0$. Направления вдоль осей с большими сингулярными числами соответствуют спуску ко дну оврага, а с малыми сингулярными числами – смещению вдоль дна оврага. Каждая итерация двухшагового метода Левенберга-Марквардта проводится в два шага. На первом шаге допускается возрастание функции невязки за счет её роста в направлениях, соответствующих большим сингулярным числам. На втором шаге проводится уменьшение функции невязки вдоль этих направлений (спуск ко дну оврага). В итоге по итерациям строится убывающая последовательность значений функции невязки. Также рассмотрена модификация двухшагового метода Левенберга-Марквардта (ДЛММ), в которой на втором шаге проводятся дополнительные спуски в направлениях, соответствующих большим сингулярным числам. Использование второго шага в двухшаговых методах ДЛМ и ДЛММ позволило сократить число итераций и вычислительные затраты процесса минимизации функции невязки за счет большего уменьшения функции невязки на каждой итерации по сравнению с классическим методом Левенберга-Марквардта (ЛМ). Приведем алгоритм метода ДЛММ. Каждая итерация состоит из последовательности следующих операций:

1. Вычисляется значение

$$J_1(\mu_n) = J(K^{n,1}),$$

где $K^{n,1} = K^{n-1} + \delta^1$, $\delta^1 = -(H + \mu_n E)^{-1} g$. При выполнении условия уменьшения функции невязки $J_1(\mu_n) < J(K^{n-1})$ новые значения переменных определяются, как $K^n = K^{n-1} + \delta^1$, параметр Марквардта уменьшается в два раза, и итерация заканчивается, иначе – переходим к пункту 2.

2. Проводится уменьшение функции невязки вдоль направлений, соответствующих большим сингулярным числам в главной системе координат. Последовательно вычисляются значения

$$J_t(\mu_n) = J(K^{n,t}), \; t = 2,3,...$$

где $K^{n,t} = K^{n,t-1} + d^t$, $d^t = V\tilde{s}_V$, $\tilde{s}_{V_i} = \tilde{g}_{V_i} / (\sigma_i + \mu_n)$, $i = 1,...,q$, $\tilde{s}_{V_i} = 0$, $i = q+1,...,142$, $\tilde{g}_{V_i}$ – компоненты вектора $\tilde{g}_V = V^T \tilde{g}$, $\tilde{g} = A^T \tilde{R}$, $\tilde{R}$ – вектор невязок в точке $K^{n,t-1}$, q – число направлений в главной системе координат, вдоль которых проводится смещение параметров, q выбирается из условия $\sigma_q > \mu_n \geq \sigma_{q+1}$. Значения $J_t(\mu_n)$ вычисляются до тех пор, пока выполняется условие

$$J_{t-1}(\mu_n) - J_t(\mu_n) > 0.01 J_{t-1}(\mu_n), \quad t \geq 2. \qquad (3)$$

Определим

$$J\mu_n = \min\{J_{t^*-1}(m_n), J_{t^*}(m_n)\},$$

где t^* – значение t, при котором условие (3) нарушается. Если $J_{\mu_n} < J(K^{n-1})$, то новые значения параметров берутся для t, соответствующего J_{μ_n}, параметр Марквардта уменьшается в два раза, и итерация заканчивается. В противном случае параметр Марквардта увеличивается в два раза, и возвращаемся к пункту 1.

Элементы матрицы чувствительности вычисляются методом прямого дифференцирования уравнения фильтрации (1) и соответствующих граничных условий, градиент функции невязки вычисляется по формуле $g = A^T R$.

Для остановки процесса минимизации использовались два критерия:

1) медленная сходимость итерационного процесса $J(K^{n-1}) - J(K^n) < 0.01 J(K^{n-1})$ в течение трёх итераций,

2) достижение заданной точности по напору в наблюдательных точках $h_{\max} = \max\limits_j \left| h_j(K^n) - h_j^* \right| < 10^{-6}$.

Численные результаты. Значения максимальной невязки h_{max}, среднеквадратического отклонения коэффициента фильтрации от истинных значений

$$\Delta \ln K_{xyz}^n = \left[\sum_{k=1}^{71} \left((\ln K_{xyk}^{tr} - \ln K_{xyk}^n)^2 + \right.\right.$$

$$\left.\left. + (\ln K_{zk}^{tr} - \ln K_{zk}^n)^2 \right) / 142 \right]^{1/2},$$

число итераций, полученные при решении модельной задачи без погрешностей в замерах напора методами Левенберга-Марквардта (ЛМ), двухшаговым методом Левенберга-Марквардта (ДЛМ) и модификацией двухшагового метода Левенберга-Марквардта (ДЛММ), приведены в табл.1. Основные вычислительные затраты приходятся на вычисление функции невязки (решение уравнения фильтрации (1)) и на вычисление элементов матрицы чувствительности. Для оценки этих затрат введём число $nc = nc1 + nc2$, где $nc1$ – число решений уравнения фильтрации (1), $nc2$ – число решений уравнений, полученных прямым дифференцированием уравнения фильтрации,

δ_j	метод	$\Delta \ln K_{xyz}^0$	$\Delta \ln K_{xyz}^{st}$	*it*	*nc*
0.1	ЛМ	1.7	1.16	58**	8321
	ДЛМ		1.08	64**	9239
	ДЛММ		1.06	46**	6735
0.01	ЛМ	1.7	0.76	207**	29774
	ДЛМ		0.52	98**	14193
	ДЛММ		0.52	63**	9424
–0.1	ЛМ	1.7	0.98	146**	20992
	ДЛМ		0.91	74**	10701
	ДЛММ		0.92	51**	7487
–0.01	ЛМ	1.7	0.77	202**	29054
	ДЛМ		0.56	100**	11481
	ДЛММ		0.55	60**	8855

Табл. 2. Усл. обозн. см. табл. 1.

для определения элементов матрицы чувствительности.

Классический метод Левенберга-Марквардта был остановлен по критерию медленной сходимости, заданная точность по напору в наблюдательных точках не была достигнута. Двухшаговыми методами Левенберга-Марквардта получены решения с заданной точностью по напору, значения коэффициента фильтрации получены более близкими к истинным значениям.

Задача идентификации коэффициента фильтрации является обратной задачей и относится к классу некорректно поставленных задач (Тихонов, 1986; Sun, 1994). При наличии погрешностей в замерах напора значения идентифицируемых параметров, начиная с некоторой итерации, обычно удаляются от своих истинных значений, при этом функция невязки продолжает уменьшаться. Для выбора номера итерации с итоговыми значениями коэффициента фильтрации применяются специальные правила останова процесса минимизации или прерывания полученной последовательности значений функции невязки. Эти правила являются одним из регуляризирующих элементов решения обратных задач.

Для выбора номера итерации с итоговыми значениями коэффициента фильтрации в случае остановки процесса минимизации по критерию медленной сходимости при решении задач с погрешностями в замерах напора в данной работе использовалась следующая процедура (Мазуров и др., 2009):

1) определялся номер итерации k, с которого начинается медленная сходимость процесса минимизации;

2) определялся максимальный номер $i = 1,2,...$, при котором выполняется условие $J^{k-i} < 1.5J^{k}$;

3) итоговые значения коэффициента фильтрации брались с итерации с номером $k - i$.

Результаты решения модельной задачи идентификации коэффициента фильтрации с погрешностями в замерах напора приведены в табл. 2.

Из приведённых результатов видно, что двухшаговые методы Левенберга-Марквардта требуют меньших вычислительных затрат по сравнению с классическим методом Левенберга-Марквардта. Модифицированный двухшаговый метод Левенберга-Марквардта с дополнительными спусками ко дну оврага показал себя наиболее эффективным по вычислительным затратам. Итоговые значения коэффициента фильтрации, полученные двухшаговыми методами Левенберга-Марквардта, ближе к истинным значениям по сравнению с классическим методом Левенберга-Марквардта. Задачи рационального использования и управления водными ресурсами, прогнозирования распространения загрязнений в водоносных пластах, разработки нефтяных месторождений требуют многократного решения задач идентификации параметров пласта. По этой причине уменьшение вычислительных затрат в алгоритмах идентификации, наряду с достоверностью определения значений параметров пласта, остаётся важной проблемой.

Литература

Дэннис Дж., Шнабель Р. Численные методы безусловной оптимизации и решения нелинейных уравнений. М.: Мир. 1988. 440.

Мазуров П.А., Елесин А.В., Кадырова А.Ш. Квазиньютоновский двухшаговый метод минимизации функции невязки. *Вычислительные методы и программирование.* 2009. 10, №1. 64-71.

Мироненко В.А. Динамика подземных вод. М. Изд-во МГГУ. 1996. 520.

Пантелеев А.В., Летова Т.А. Методы оптимизации в примерах и задачах. М.: Высш. шк. 2005. 544.

Тихонов А.Н., Арсенин В.Я. Методы решения некорректных задач. М.: Наука 1986. 288.

Hill M.C. Solving groundwater flow problems by conjugate-gradient methods and the strongly implicit procedure. *Water Resour. Res.* 1990. Vol.26. No.9. 1961-1969.

Hill M.C. Methods and guidelines for effective model calibration. U.S Geological survey water-resources investigations report 98-4005. Denver, Colorado. 1998.

Sun N.-Z. Inverse Problems in Groundwater Modeling. Kluwer Acad., Norwell, Mass. 1994. 337.

A.V. Elesin, A.Sh. Kadyrova, P.A. Mazurov. **The two-step Levenberg-Marquardt methods in hydraulic conductivity identification task.**

The two-step Levenberg-Marquardt methods are proposed for the minimization of a residual function. The proposed methods and the classical Levenberg-Marquardt method are compared on solving model problem of hydraulic conductivity identification for a three-dimensional anisotropic confined aquifer. The numerical results are shown the efficiency of the two-step Levenberg-Marquardt methods.

Keywords: mathematical modeling, minimization of residual function, inverse problem.

Андрей Викторович Елесин

К.ф.-м.н., старший научный сотрудник.

Альфия Шамилевна Кадырова

Научный сотрудник.

Петр Алексеевич Мазуров

К.ф.-м.н., ведущий научный сотрудник, и.о. зав. лабораторией.

Институт механики и машиностроения Казанского научного центра РАН, лаборатория математического моделирования гидрогеологических процессов.

420111, Россия, Казань, ул. Лобачевского, 2/31. Тел.: (843) 292-74-90.