扩散模型的源项反演及其应用

李功胜　姚德　著

科学出版社

扩散模型的源项反演及其应用

李功胜　姚　德　著

科　学　出　版　社

北　京

内 容 简 介

本书主要探讨扩散模型的源项及源项系数反问题的适定性理论、正则化算法及其应用. 第1章概括性地介绍源项反问题. 第2章简要介绍基于扩散模型的源项反问题、一般扩散及对流弥散模型. 第 3 章和第 4 章是对于不同类型源项及源项系数反演的条件适定性理论分析，主要讨论基于正问题解之表达式的不动点方法和基于伴随问题控制的变分伴随方法. 第 5 章和第 6 章是反演算法与数值模拟，应用正则化子方法给出 Tikhonov 正则化的改进形式，并探讨适用于一般源项及系数函数重建的最佳摄动量正则化算法. 第 7 章是源项反问题的应用研究，从问题提出、数据获取、模型构建、参数反演到问题解决，给出源项反演在区域地下水污染源强度识别和土柱渗流试验问题中的应用实例.

本书可作为大学教师、科研机构的研究人员以及传质传热与地质环境等实际部门工程师的参考书，也可以作为数学、力学、工程热物理、水文地质学、环境科学等相关专业的研究生和高年级本科生的参考书.

图书在版编目(CIP)数据

扩散模型的源项反演及其应用/李功胜,姚德著. —北京：科学出版社, 2014.6

ISBN 978-7-03-040763-4

Ⅰ. ①扩… Ⅱ. ①李… ②姚… Ⅲ. ①扩散模型–研究 Ⅳ. ① F224.0

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2014) 第 111120 号

责任编辑: 徐园园 赵彦超 / 责任校对: 钟 洋

责任印制: 赵德静 / 封面设计: 陈 敬

科学出版社 出版

北京东黄城根北街 16 号

邮政编码: 100717

http://www.sciencep.com

北京源海印刷有限责任公司 印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2014 年 5 月第 一 版 开本: 720 × 1000 1/16

2014 年 5 月第一次印刷 印张: 15 3/4

字数: 305 000

定价: 78.00 元

(如有印装质量问题, 我社负责调换)

前　言

数理方程反问题是 20 世纪五六十年代兴起的属于偏微分方程理论与工业应用及计算数学等研究领域的一门交叉学科方向. 数理方程正问题, 即指偏微分方程的初边值 (定解) 问题. 一般来说, 对于一个数理方程定解问题, 如果模型算子, 或边界算子的某些系数未知, 或右端项未知, 或初始状态未知, 又或解的存在区域特征需要确定, 则在物理规律的限制下, 给出关于解的某些附加信息, 进而求出解及未知项, 这就是所谓的数理方程反问题. 譬如, 考察下面的数学模型

$$\begin{cases} L(D)u = f, \ (x,t) \in \Omega \times (0,T), \\ Bu = g, \ (x,t) \in \partial\Omega \times (0,T), \\ u|_{t=0} = u_0, \ x \in \Omega, \end{cases} \tag{$*$}$$

其中

$u = u(x,t)$: 状态变量;

L: 依赖于参数 D 的模型算子 (微分算子), $D = D(x,t;u)$: 表征模型算子特征的系数;

B: 边界算子, g: 边界函数;

f: 源/汇项 (函数), 表征物质在扩散过程可能发生的物理/化学作用; u_0: 初值函数;

Ω: 研究区域, $\partial\Omega$: Ω 的边界.

一般说, 由问题 $(*)$ 求解 $u = u(x,t)$ 是数理方程正问题. 另一方面, 若问题 $(*)$ 中除了状态量 u 未知以外, 还有模型参数, 或源/汇项, 或边界流量, 或初始分布, 或研究区域的几何特征等也是未知的, 此时如果能够额外 (测量) 获得关于解的部分信息, 就会导致所谓的数理方程反问题.

反问题往往表现出非线性和病态性 (不适定性) 等特点, 原因主要在于方程的解所蕴涵的信息量要远远小于已知方程及条件（数据）所含的信息量, 因而根据解的部分信息来反演未知系数 (包括解本身) 显然是很困难的事. 但是, 开展反问题研究, 不仅是数学学科本身发展的需要, 是偏微分方程与工业应用等学科交叉发展的需要, 而且反问题研究在国民经济, 特别是地球物理、资源勘探、工业工程、生命医学、军事科学及环境科学等领域展现出越来越多的应用前景. 另一方面, 从科学史上看, 重大的科学发现、发明及重大理论的诞生往往是对正问题及其相应反问题研究的结果. 因而, 开展反问题研究具有重大的科学创新意义和深刻的应用背景.

事实上, 正问题是我们所熟知的发展相对较完善的问题, 一般表现出适定性. 但在数理科学及工程技术中, 所遇到的问题至少有一半属于不适定的反问题. 反问题是相对于正问题而言的. 关于反问题, 依照正问题的研究思路, 首先要解决的是反演解的存在唯一性, 以及反演解对已知数据的连续依赖性, 而后是数值求解与反问题的应用研究. 反问题解的存在唯一性依赖于反演系统的代数性质, 通常可以通过限制解空间 (模型空间) 等数学方法和技巧而得到. 稳定性依赖于空间的拓扑性质, 因而需要在一定条件下改变空间的拓扑结构, 这就是反问题的条件稳定性研究. 其次, 对于反问题及病态问题的求解, 一般的数值方法几乎难以实现, 这使得不适定问题的数值解法成为反问题研究的又一个主要方面. 最后, 反问题一般来源于实际问题. 反问题研究的主要目的, 一是数学理论方法本身的发展, 二是解决科学与工程实际问题的需要. 可以说, 对于数学物理反问题的应用研究已成为反问题研究的重要方面.

本书主要探讨基于扩散模型的连续源项反演及其应用, 这是一类以污染物扩散或溶质运移为背景的抛物型方程系数反问题. 事实上, 热量的传导、物质的输运、溶质的运移等均可以用扩散模型来描述. 模型中的扩散 (弥散) 系数是揭示传输行为的主要参数, 而数学意义上的源项则可用以描述溶质传输过程中可能发生的物理/化学作用, 但它们往往是不可直接测量的, 需要根据适当的附加信息进行反演确定. 这就导致了基于扩散模型的源项及源项系数与扩散 (弥散) 系数的反问题研究.

本书首先介绍物质传输扩散的一般模型, 然后讨论关于源项及源项系数反问题理论研究的两种方法 —— 不动点方法与变分伴随方法. 不动点方法通常要借助于正问题解的表达式联合附加信息, 将反问题转化为一个算子方程的求解问题, 再应用不动点定理获得反问题解的存在唯一性. 变分伴随方法是通过对一个伴随问题的解的分析与控制, 得到一个联系已知数据与未知项的变分恒等式, 进而获得反问题解的存在唯一性和条件稳定性. 一般来说, 反问题求解可以归结为一个误差泛函的极小问题, 而且各种反演算法几乎都要用到正则化思想. 本书主要结合作者的研究工作, 讨论基于奇异系统分解的 Tikhonov 正则化方法及其改进形式, 并着重探讨一种基于函数逼近、梯度近似与迭代控制的最佳摄动量正则化算法及其数值实现, 并给出反演方法在水文地质学与环境科学中的一些应用实例.

本书的工作得到了国家自然科学基金项目 (Nos. 10471080, 10926194,11071148)、山东省自然科学基金项目 (No. Y2007A29)、内蒙古自治区草原英才项目、内蒙古自治区自然科学基金项目以及山东理工大学科技基金项目的资助, 作者在此深表感谢! 山东理工大学的贾现正博士, 硕士研究生范小平、刘进庆、马昱、魏镇、池光胜、王静、娄和忠、张大利、李慧玲等对本书的完稿做了许多工作, 在此表示感谢!

同时, 非常感谢西安交通大学的马逸尘教授、黄艾香教授、李开泰教授和郑州

大学的袁忠信教授、石东洋教授！他们是第一作者的启蒙老师, 他们给了第一作者开启数学物理反问题研究大门的金钥匙. 非常感谢复旦大学的谭永基教授和程晋教授！第一作者曾多次到复旦大学访问求学, 是他们把第一作者带入了计算数学与数学应用研究的新天地. 特别感谢淄博市水资源管理办公室的王孝勤总工程师和山东省地质环境监测站的刘洪亮工程师！他们不仅为本书中应用研究部分提供了试验数据, 而且对模型构建给予了有益的指导和帮助. 特别感谢山东理工大学的张宗新教授、王永在博士、杨富贵博士、蒋恒毅博士！作者经常与他们交流探讨区域水文地质学及土柱渗流试验中的相关问题, 他们也为本书第 7 章应用部分的完成做出了贡献. 此外, 感谢美国中佛罗里达大学的 Nashed 教授和日本东京大学的 Yamamoto 教授！第一作者曾在 Tikhonov 正则化方法的改进和反演稳定性研究等方面与两位专家学者有过交流与合作而感觉受益匪浅. 最后, 更要感谢作者的家人, 特别是第一作者的妻子刘惠娟女士和第二作者的妻子夏宁研究员, 是她们给了作者完成此书的强大动力.

书中大部分内容是作者十余年来科研工作的总结, 有些内容还未公开发表, 且囿于作者的学识及能力, 书中难免有疏漏和不当之处, 热切欢迎读者批评指正.

作　者

2013 年 12 月

目　录

第 1 章　绪　　论

1.1　源项反问题概述

反问题研究的蓬勃发展始于 20 世纪 60 年代前后, 研究对象主要涉及与探测、识别和设计有关的应用问题. 20 世纪 70 年代, 世界上第一台用于探测脑部肿瘤的 CT 机的发明是反问题应用的一个典型范例[117]. 同时一批著名科学家在地球物理反问题、工业应用数学等领域开展了卓有成效的研究, 特别是 Tikhonov[263, 264], Cannon[19, 21], Colton 与 Kress[57−59], Rundell[237−239], Engl[74, 79, 82] 以及 Sylvester 与 Uhlmann[257, 258] 等, 极大推动了国际上对数学物理反问题的研究热潮 (见专著 [5, 6, 14, 125, 140, 215, 219, 234] 等). 国内自 20 世纪 80 年代初冯康先生倡导以来, 反问题研究得以快速发展, 并取得了很多理论研究和实际应用的成果 (见专著 [100, 132, 189, 198, 208, 251, 278, 286] 等). 复旦大学、中国科学院计算数学研究所与应用数学研究所、哈尔滨工业大学、东南大学等高等院校及研究所形成了国内外有一定影响的反问题研究团队.

一般而言, 相关的两个问题, 若其中一个的前提正好是或部分是另一个问题的结论, 则这两个问题互为逆问题[136]. 通常由于历史原因, 其中一个问题研究得早一些, 发展得成熟些, 就称为正问题; 另一个发展得晚一些、慢一些, 就称为反 (逆) 问题. 正问题的研究从内容上讲起着由一般到具体、由原因到结果、由本质到现象、由微观到宏观的作用. 它相对比较成熟, 大都体现了对人类已积累的肯定知识的继承、应用与发展. 到目前为止, 在教学和科研中占有主导地位; 反问题则往往是由果求因、由表及里、由现象到本质, 它的研究发展多数是不成熟的, 其探索性和风险性非常突出. 近 40 年来, 反问题研究得到了国内外学者的广泛关注. 特别是 20 世纪 80 年代中期 *Inverse Problems* 杂志的创立, 更使得这一研究方向成为各门数理学科与工程技术中的热门研究领域.

在物质的变化与演变中, 所谓的源或汇的属性往往是未知的, 源与汇统称为源项. 关于源项及其系数的确定 (控制) 问题, 即源项与源项系数反问题一直是数理方程反问题研究中的一个热点和前沿问题 (见 [7, 14, 19, 21, 237] 等). 下面先看几个典型的关于源项及源项系数反演问题的例子.

例 1.1.1(地下热源强度的反演)　元素的放射性衰变引起地壳温度的升高, 其温度分布满足半平面上的热传导方程

$$u_t - \Delta u = e^{-\lambda t} f(x, y), \quad 0 < y < \infty, -\infty < x < \infty, \tag{1.1.1}$$

其中 λ 是放射性元素的半衰期, $f(x,y)$ 为热源强度. 设初始的温度分布为零, $y=0$ 边界处的测量值为

$$u(x,0,t)=g(x,t), \tag{1.1.2}$$

则当 λ, $f(x,y)$ 以及边值函数 $g(x,t)$ 均已知时, 我们得到求解温度分布的定解问题 (正问题). 当 f 未知时, 必须再给定某些附加条件, 以确定温度分布和热源强度. 比如, 若测得地下 $y_1(0<y_1<\infty)$ 深处的温度分布:

$$u(x,y_1,t)=\theta_1(x,t), \tag{1.1.3}$$

或测知地表温度沿深度方向的变化率:

$$u_y(x,0,t)=\theta_2(x,t), \tag{1.1.4}$$

则由正问题联合附加条件 (1.1.3) 或 (1.1.4) 便构成了确定地下热源强度的一类源项反演问题 (见 [251] 等).

例 1.1.2(地下水污染源强度的确定)　考察一个区域地下含水层的硫酸盐污染问题. 该区域可作为一个相对独立的水文地质单元, 是一受区域构造所控制的半封闭三角地带. 由于各类矿产资源的过度开发, 特别是许多煤井的大量开采, 导致了这一地区地下水的硫酸盐污染越来越严重. 在适当的假定条件下, 以 $u=u(x,t)$ 表示该区域地下含水层水中硫酸根的浓度, 则有一维对流弥散模型

$$\frac{\partial u}{\partial t}+v\frac{\partial u}{\partial x}-D_L\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}+\lambda u=\frac{q}{n_e},\quad 0<x<l,\ 0<t<T, \tag{1.1.5}$$

其中 $q=q(x)$ 表示污染物入渗含水层的强度, 即单位时间入渗单位体积含水层的硫酸根质量. 为了确定该污染强度函数 $q=q(x)$, 需要附加一定的测量信息以构成一个反演问题. 比如, 若已知某一年份在区域内若干点处的浓度分布数据

$$u(x_j,T)=u_T(x_j),\quad j=1,2,\cdots,J, \tag{1.1.6}$$

则由模型 (1.1.5) 及适当的初边值条件, 联合附加数据 (1.1.6) 即构成一个关于区域地下水污染源强度的反演问题 (见 [8, 169] 等).

例 1.1.3(扩散问题中污染源位置及强度的确定)　考察非均匀介质中的扩散问题

$$u_t-\mathrm{div}(\mathbf{D}\nabla u)=f(x,t),\quad x\in\Omega\subset\mathbf{R}^d,\ t>0, \tag{1.1.7}$$

其中 $u=u(x,t)$ 表示状态量, $\mathbf{D}=\mathbf{D}(x)$ 是扩散系数 (张量), $f(x,t)$ 是未知的源项 (外力项). 有时外力源项具有分布参数形式:

$$f(x,t)=\sum_{i=1}^{I}m_i(t)\delta(x-x_i),\quad x_i\in\Omega, \tag{1.1.8}$$

其中 $m_i(t)$ 表示源强度, x_i 表示源的位置, I 是点源的数量. 实际问题中, 这三个参数或其部分往往是需要通过野外现场勘测来确定. 当然, 若给定初边值条件:

$$u(x,0)=u_0(x),\ x\in\Omega,\quad \frac{\partial u}{\partial\nu}=q(s,t),\ s\in\partial\Omega, \tag{1.1.9}$$

以及边界上的附加信息

$$u|_{\partial\Omega}=p(s,t), \tag{1.1.10}$$

则由 (1.1.7), (1.1.9) 与 (1.1.10) 即构成一类关于识别确定扩散源位置及强度的反演问题 (见 [251] 等).

例 1.1.4(物理/化学反应项及反应系数的识别问题) 考察如下模型:

$$u_t-\mathrm{div}(\mathbf{D}\nabla u)=f(x,u),\quad x\in\Omega,t>0, \tag{1.1.11}$$

或

$$u_t-\mathrm{div}(\mathbf{D}\nabla u)=a(x)g(u),\quad x\in\Omega,t>0, \tag{1.1.12}$$

以及

$$u_t-\mathrm{div}(\mathbf{D}\nabla u)=\beta(t)u,\quad x\in\Omega,t>0, \tag{1.1.13}$$

等等, 其中右端项中的 $f(x,u)$, $a(x)$ 或 $g(u)$, 或 $\beta(t)$ 等都是表示相应问题中的物理/化学反应规律的源项或源项 (反应) 系数. 关于这些难以直接观测获得的未知函数的确定问题, 在适当的初边值条件与附加信息条件下, 就构成需要进一步深入研究的源项及源项系数反演问题 (见 [29, 89] 等).

1.2 病态性与条件适定性

考察一类反问题模型的具体构建. 我们知道, 一个结果的产生总是有原因的. 如果以函数 $x=x(s)$ 表示原因, 经过模型算子 K 的作用产生的结果记为 $y=y(t)$, 即有关系 $y=Kx$. 那么, 已知模型 K 及函数 x, 确定 y 的问题就是正问题; 而由 K 和 y 来推演 x 或已知 y,x 来构建模型 K 的问题就是反问题. 通常, 一个确定的结果产生于一系列的原因, 运用积分思想得到下述表示因果关系的积分方程:

$$\int_a^b k(t,s)x(s)ds=y(t),\quad c\leqslant t\leqslant d, \tag{1.2.1}$$

其中 $k(\cdot,\cdot)$ 称为积分核. 这就是第一类的 Fredholm 积分方程. 譬如, 在例 1.1.1 中, 记 $M=M(x,y;t)$ 为半空间中热传导算子 $\dfrac{\partial}{\partial t}-\Delta$ 的第一边值问题的 Green 函数, 则可得正问题解的表达式为

$$u(x,y,t)=\phi(x,y,t)+\int_0^t\int_0^\infty\int_{-\infty}^\infty M(x-\xi,y-\eta,t-\tau)e^{-\lambda\tau}f(\xi,\eta)d\xi d\eta d\tau,$$

其中 $\phi(x,y,t)$ 为对应于边值条件 (1.1.2) 的齐次方程的解. 再联合附加条件 (1.1.3), 即有第一类的 Fredholm 积分方程

$$K[f](x,t):=\int_0^t\int_0^\infty\int_{-\infty}^\infty M(x-\xi,y_1-\eta,t-\tau)e^{-\lambda\tau}f(\xi,\eta)d\xi d\eta d\tau=\bar{\theta}_1(x,t),\quad (1.2.2)$$

其中 $\bar{\theta}_1(x,t)=\theta_1(x,t)-\phi(x,y_1,t)$.

事实上, 反问题往往可化为第一类算子方程

$$Kx=y \quad (1.2.3)$$

的求解问题. 其中 $K:X\to Y$ 为有界算子, X,Y 为 Hilbert 或 Banach 空间. 对于这一问题, 一般从解的存在性、唯一性、稳定性以及数值方法等四个方面进行研究. 理论上主要是适定性的研究. 在 Hadamard 意义下, 方程 (1.2.3) 是适定的, 指下述三个条件都成立:

(i) 存在性. $\forall y\in Y$, 方程有一个解 $x\in X$;

(ii) 唯一性. $\forall y\in Y$, 至多存在一个 $x\in X$ 满足方程;

(iii) 稳定性. 当 $\|y-\bar{y}\|_Y\to 0$ 时, 有 $\|x-\bar{x}\|_X\to 0$, 其中 $x,\bar{x}$ 分别是对应于数据 $y,\bar{y}$ 的解.

相应地, 所谓不适定性, 亦称病态性, 是指上述三条之中至少有一条不满足. 令人感到麻烦的是第一类算子方程的求解, 即使算子是线性的, 其求解往往也是病态的. 以第一类 Fredholm 积分方程 (1.2.1) 为例, 下面看几个例子 (见 [97] 等).

例 1.2.1　设 $k(t,s)=1,\forall(t,s)\in[0,1]\times[0,1]$, 则方程 (1.2.1) 有解 $\Leftrightarrow y=\text{const}$. 换句话说, 此时, 若数据 y 不是常数, 则方程 (1.2.1) 无解; 而当 y 取常数时, 方程又有无穷多个解.

例 1.2.2　设 $k(t,s)=e^{ts}$, 则当 $y(t)=|t-1/2|, 0\leqslant t\leqslant 1$ 时, 方程 (1.2.1) 在 $L^2(0,1)$ 中不存在有界解. 事实上, 如果方程 (1.2.1) 存在非平凡解 $x(s)$ 且可积, 则设 $\int_0^1 e^s x(s)ds=c\neq 0$, 应有 $e^t=\frac{1}{c}|t-1/2|,\forall t\in[0,1]$. 这是矛盾.

例 1.2.3　对于 $0\leqslant s\leqslant 1$, 设

$$k(t,s)=\begin{cases}0, & 0\leqslant t\leqslant 1/2,\\ 1, & 1/2<t\leqslant 1,\end{cases}$$

则方程 $\int_0^1 k(t,s)x(s)ds=0$ 至少有两个解 $x(s)=0$ 与 $x(s)=s-1/2$.

例 1.2.4 取

$$k(t,s)=\begin{cases} s(1-t), & 0\leqslant s\leqslant t,\\ t(1-s), & t<s\leqslant 1.\end{cases}$$

容易验证, 如果 x 是方程 (1.2.1) 的对应于数据 y 在连续空间中的解, 则 y 满足边值问题

$$\begin{cases} y''(t)+x(t)=0,\ 0<t<1,\\ y(0)=y(1)=0.\end{cases}$$

从而, 当数据 y 有扰动时, 不妨设 $\|y_\delta-y\|_\infty\leqslant\delta\ll 1$, 其中 y_δ 为实际测量的右端数据. 如取 $y_\delta-y=\delta(t-1)\sin(t/\delta)$, 则有

$$y_\delta''-y''=-\cos(t/\delta)+\delta^{-1}[(1-t)\sin(t/\delta)],$$

从而, 相应的解误差估计为

$$\|x_\delta-x\|_\infty=\|y_\delta''-y''\|_\infty\to\infty\quad(\delta\to 0).$$

这说明, 数据的小扰动导致了解的无穷大变化. 所以, 该问题的求解是不适定的.

从本书涉及的研究内容看, 线性连续源项的反演往往是线性的, 而关于源项系数的反演往往是非线性的. 譬如, 考察方程 (1.2.2), 显然算子 K 关于 f 是线性的. 但若考虑扩散方程 $u_t-Du_{xx}=q(x)u$ (或 $u_t-Du_{xx}=\beta(t)u$) 中由终值数据 (或边值数据) 确定反应系数 $q=q(x)$(或 $\beta=\beta(t)$) 的反问题 (见第 4 章), 虽然是线性模型方程, 但由于解算子 $q\to u(q)(x,t)$(或 $\beta\to u(\beta)(x,t)$) 关于 q (或 β) 是非线性的, 因而利用解的附加信息所得到的积分算子关于 q (或 β) 也是非线性的. 不过, 无论是线性的, 还是非线性的源项 (系数) 反演问题, 当其转化为具有非退化光滑核的第一类 Fredholm 积分方程问题时, 其求解都是不适定的. 此时, 由于数据测量误差的不可避免性和计算机舍入误差的存在性, 直接进行数值计算是危险的. 因而, 对于第一类算子方程的求解必须采用稳定化的数值方法. 第 5 章将讨论算子方程 (1.2.3) 的条件适定性与正则化求解方法.

1.3 本书的主要工作

如前所述, 正问题与反问题是相对的, 是一对有因果关系的统一体. 基于数理方程的正问题是通常所说的定解问题, 而对于大多数实际问题, 从中抽象出的数学问题往往含有一些不能直接测量、或者需要很大代价才能获知的量. 这时, 就会导致关于数理方程反问题的研究. 需要从哪些方面研究一个反问题呢?

首先, 必须重视正问题的研究, 包括正问题模型及其解的存在唯一性、稳定性与数值解法等. 其次, 应该考虑下面的工作:

• 反问题解的唯一存在性

一般来说, 自然发生的过程是不可逆的, 因而一个逆过程问题要比正问题复杂很多. 对于一个反问题, 我们必须知道如何附加合理的信息, 要研究多少数据 (函数) 满足哪些条件能够保证反问题解的存在唯一性等理论问题, 这是反问题理论研究的重要方面 (见 [41, 46, 83, 84, 256] 等). 本书主要关注应用不动点方法证明源项及源项系数反演的存在唯一性.

• 反演的稳定性分析

对于一个反问题, 还需要探求当已知数据 (函数) 发生小扰动时, 或面对模型及计算误差时, 相应解的变化是否很大; 如何选择反演解及数据空间的拓扑度量, 以建立解对数据的连续依赖性, 这就是反演的条件稳定性分析. 反问题的条件稳定性相比反演解的唯一性研究更具有挑战性 (见 [43–45, 47, 142, 203] 等). 本书主要关注基于变分伴随方法的源项及源项系数反演条件稳定性的构建.

• 数值反演算法

应该说, 唯一性和稳定性是反问题研究的重要内容, 但是从理论到实践还有一段很长的路. 反问题研究的一个重要方面是构建有效的反演算法, 能够重建观测数据并获得反问题的数值解. 本书主要关注 Gauss-Newton 型的最佳摄动量正则化算法.

• 反问题的应用

最后, 在理论研究的基础上, 还应该考虑反问题的实际应用, 这是反问题研究的主要目的. 一个好的反问题一定来源于实际问题, 当从数学意义上构成一个反问题, 并进行适定性理论分析和数值算法模拟之后, 当然应该回到实际问题. 要注意理论分析和算法模拟可能与实际问题的解决相距甚远, 但我们必须走这一步. 本书主要关注对流弥散–反应扩散方程源项及系数反演在区域土壤及地下水污染问题中的若干应用.

综上, 本书将以扩散模型的源项及源项系数反演问题为主线, 研究反问题的条件适定性、正则化反演算法及其应用. 理论上, 从基于正问题解之表达式的不动点方法到基于极值原理和变分恒等式的变分伴随方法. 数值算法上, 从应用角度出发, 探讨数值反演确定源项及系数的一种有效算法 —— 最佳摄动量正则化算法及其计算机实现. 最后以多孔介质中溶质运移实际问题为例, 介绍源项反演的若干应用. 第 2 章至第 7 章的主要内容如下.

第 2 章介绍物质对流扩散的一般数学模型. 2.1 节和 2.2 节介绍物质扩散的一般迁移模型与对流扩散的基本性质, 2.3 节基于 Fick 扩散定律和质量守恒定律, 给出多孔介质中溶质运移的对流弥散模型, 这些扩散模型在后面的章节中会被多次提及和应用. 此外, 2.4 节简要介绍抛物型方程的极值原理与 Green 函数等预备知识.

第 3 章介绍源项及系数反演的不动点方法. 3.2 节对于方程 $u_t - u_{xx} = f(u)$, 讨

论一类复杂边界条件下由区域内部一点的连续观测值确定非线性源项 $f(u)$ 的反问题. 利用正问题解的表达式, 化反问题为一个积分方程组问题, 进而应用不动点定理证明源项解在 Hölder 空间的存在唯一性. 3.3 节对于方程 $u_t - u_{xx} = a(x)g(u) + \gamma(x,t)$, 研究在 Dirichlet-Neumann 附加数据条件下, 确定非线性源项 $g(u)$ 的反问题, 同样证明源项解在 Hölder 空间的存在唯一性. 最后在 3.4 节, 对于方程 $u_t - D\Delta u + a(x)u = 0$, 研究终值数据条件下确定源项系数 $a(x)$ 的反问题, 应用极值原理及不动点方法证明反问题解的唯一存在性.

第 4 章介绍源项及系数反演的变分伴随方法. 4.1 节以一维线性源项反演为例, 考虑方程 $u_t - D\ u_{xx} + vu_x = \alpha(t)f(x)$ 中由终值数据确定源强函数 $f(x)$ 的反问题. 基于一个联系已知数据与未知函数的变分恒等式, 证明源项解的存在唯一性及反演的条件稳定性. 4.2 节讨论一维土柱渗流试验模型 $u_t - Du_{xx} + vu_x = \beta(t)u$ 中由边值 (出流) 数据确定时间依赖的源项系数 $\beta = \beta(t)$ 的反问题. 注意到此时解算子的非线性性, 反演解的存在性由误差泛函极小点的存在性而得到, 而反演的条件稳定性仍由一个变分恒等式和对伴随问题解的控制而获得. 4.3 节讨论高维对流扩散方程 $u_t - D\Delta u + \mathbf{v}\cdot\nabla u = q(x)u$ 中由终值数据确定空间依赖的源项系数 $q = q(x)$ 的反演问题, 同样应用变分伴随方法获得反演解的条件稳定性. 最后, 4.4 节考虑方程 $u_t - D\ u_{xx} = a(x)g(u)$ 中确定非线性源项 $g(u)$ 的反问题, 应用变分伴随方法不仅证明非线性源项解的唯一性, 而且通过限制伴随问题的解空间, 构建反演的一种条件稳定性, 并给出理论算例.

第 5 章介绍正则化方法. 5.1 节以积分方程和线性方程组为例, 分析不适定问题求解的病态性. 5.2 节给出病态问题求解的条件适定性及一般正则化策略. 5.3 节基于正则化子的概念, 介绍正则化理论方法, 特别是常用的 Tikhonov 正则化. 5.4 节基于改进的 Tikhonov 正则化子, 研究 Tikhonov 正则化方法的两种改进形式, 并给出最佳正则参数的先验选取和后验选取方法. 5.5 节应用 Tikhonov 正则化及其改进方法, 以 Symm 积分方程及第一类 Fredholm 积分方程、数值微分问题与高阶 Hilbert 矩阵方程求解为例, 给出实现正则化算法的几个算例.

第 6 章介绍参数反演的最佳摄动量正则化算法. 6.1 节以一维对流弥散方程确定时间依赖源项系数的反问题求解为例, 基于有限维逼近、线性化近似、迭代近似与正则化逼近等过程, 给出一般的最佳摄动量算法及影响算法实现的主要因素. 6.2 节对于 4.2 节中讨论的时间依赖源项系数的反问题, 应用最佳摄动量正则化算法进行相应的数值反演模拟, 验证数据相容性分析的正确性. 6.3 节对于 4.3 节中提出的空间依赖源项系数反问题, 应用最佳摄动量算法分别在一维及二维情形进行数值反演模拟研究. 6.4 节对于 3.3 节和 4.4 节讨论的非线性源项反问题, 同样应用最佳摄动量算法进行数值反演模拟研究. 6.5 节考虑二维对流扩散方程中由终值数据同时确定扩散系数与线性源项的参数联合反演问题, 这是一类病态性相对较为严重的

多参数反演问题. 采用一种基于 Sigmoid 型传输函数的正则化参数, 应用最佳摄动量正则化算法进行数值反演模拟, 并从实际应用的角度讨论附加数据选取对于反演算法的影响.

第 7 章介绍源项反演在水文地质学及土壤环境科学中的若干应用. 首先在 7.1 节, 介绍土壤及地下水污染研究中的反问题研究现状及发展动态, 着重于探讨二维流动与溶质运移的耦合模型, 以及基于吸附定律的一般溶质传输模型及相关反问题. 7.2 节探讨一个区域地下含水层硫酸盐污染源强度的确定问题, 在终值数据条件下, 分别应用数据相容性分析方法和最佳摄动量算法, 对污染物的平均入渗强度进行反演确定. 7.3 节基于一个原状土柱渗流试验模型数据, 分别应用单组分及多组分运移模型, 应用最佳摄动量正则化算法反演确定关键参数, 重建观测数据并获得所考察离子浓度的时空分布. 最后在 7.4 节, 根据一个扰动土柱渗流试验及测试数据, 提出一类带时间依赖源项系数的对流–反应–弥散模型, 基于数据相容性分析和穿透数据, 应用最佳摄动量正则化算法对未知的源项系数进行数值反演确定, 给出试验结果的合理解释并重建观测数据.

第 2 章　扩散模型简介

2.1　一般扩散模型

在研究物理学、力学、生态学、环境科学与工程技术等实际问题的过程中, 有许多被考察的量不停地在空间进行传递和扩散, 如物质的浓度、热量, 流体的质量、能量等. 一般地, 统称这些量为 (被) 扩散量. 扩散量与其所在的空间位置和时间是相关的, 应用物质守恒定律可以建立扩散量的扩散模型 (见 [34, 128, 282] 等).

2.1.1　一般扩散方程

设 $\Omega \subset \mathbf{R}^3$ 为一有界区域, $\partial\Omega$ 为其边界, 记 $u(x,t)$ 为 Ω 上的扩散量密度函数, 其中 $x \in \mathbf{R}^3$ 为空间点, $t > 0$ 为时间. 易知时刻 t, Ω 上的总扩散量为

$$\int_\Omega u(x,t)dx.$$

扩散量对于空间曲面而言是穿过曲面而传输扩散的, 因此, 垂直穿过曲面的扩散量就是扩散量相对该曲面的通量, 如磁场中穿过曲面的磁力线称为磁通量, 电场中有电通量等.

设 t 时刻 x 点处扩散量的通量密度为 $q(x,t)$, 它是一个向量场, 其方向为扩散量移动的方向. 于是, 在时刻 t 流出区域 Ω 的扩散量为

$$\oint_{\partial\Omega} q(x,t)\cdot\nu \, dS,$$

式中 ν 为曲面 $\partial\Omega$ 的单位外法向量, dS 为面积微元. 这样, 如果区域 Ω 内没有关于扩散量的生成源或汇, 则 t 时刻 Ω 内总扩散量的变化率应等于通过边界流出 Ω 的扩散量之和, 即有守恒关系

$$\frac{d}{dt}\int_\Omega u(x,t)dx = -\oint_{\partial\Omega} q(x,t)\cdot\nu dS. \tag{2.1.1}$$

对于连续场, 上式右端项应用 Gauss 公式即得

$$\int_\Omega \frac{\partial u(x,t)}{\partial t}dx = \int_\Omega \operatorname{div}(-q)dx.$$

在一般情形, 可设通量密度与 Ω 内扩散量梯度成正比, 即有

$$q = -\mathbf{D}\ \nabla u,$$