УДК 517.9:519.6
DOI: 10.32626/2308-5916.2019-19.5-10

В. А. Богаєнко, канд. техн. наук,
В. М. Булавацький, д-р техн. наук,
А. В. Гладкий, д-р фіз.-мат. наук

Інститут кібернетики імені В. М. Глушкова НАН України, м. Київ

ІДЕНТИФІКАЦІЯ ПАРАМЕТРІВ ОДНІЄЇ ДРОБОВО-ДИФЕРЕНЦІАЛЬНОЇ МОДЕЛІ МІГРАЦІЇ РОЗЧИННИХ РЕЧОВИН

Розглядається задача ідентифікації параметрів моделі у випадку математичного моделювання дробово-диференціальної динаміки аномального процесу конвективної дифузії розчинних речовин при профільній усталеній фільтрації ґрунтових вод з вільною поверхнею. При цьому, процес масопереносу описується моделлю, що містить узагальнену похідну дробового порядку Капуто–Герасимова за часовою змінною, а процес фільтрації розглядається у потенціальному полі швидкостей. Оскільки область фільтрації є областю з частково невідомою межею, розв’язання поставленої задачі виконується шляхом попереднього переходу до області комплексного потенціалу при відомій характеристичній функції течії. Ставиться задача ідентифікації значень параметрів узагальненої дробової похідної, виходячи з вимірів концентрації речовини. Такий підхід дозволяє більш адекватно описувати процеси масопереносу в середовищах із складною просторово-часовою структурою, у тому числі в ґрунтах у ситуації істотної затратності їх точного геофізичного аналізу. З огляду на складність вирішення обернених задач для диференціальних рівнянь з дробовими похідними, фіксовану кількість і неперервність параметрів, що визначаються, пропонується використовувати для їх ідентифікації метаевристичний алгоритм рою частинок. В роботі стисло викладена скінченно-різницева методика наближеного розв'язання прямої задачі, наведена постановка задачі ідентифікації параметрів, описана використовувана варіація алгоритму рою частинок. Наведено результати комп'ютерних експериментів, які показують ефективність алгоритму рою частинок для визначення параметрів похідної дробового порядку, а також те, що в залежності від вигляду функціонального параметра узагальненої дробової похідної, модель дозволяє описувати як «надповільні», так й «надшвидкі» дифузійні режими.

Ключові слова: *динаміка аномальних конвективно-дифузійних процесів, усталена профільна фільтрація ґрунтових вод, дробово-диференціальні математичні моделі перене-*

сення, узагальнена похідна Капуто–Герасимова, ідентифікація параметрів моделі, метод рою частинок.

Вступ. Відомо, що ефективні методи визначення параметрів технологічних процесів промивання ґрунтів і очищення засолених ґрунтових вод, а також вод, забруднених промисловими або побутовими стоками, базуються на використанні методів математичного моделювання [1–3]. У випадку складної просторово-часової структури середовища мають місце нелокальні процеси перенесення, що досить адекватно описуються дробово-диференціальними математичними моделями [4–7]. При цьому особливої актуальності набуває розробка комп'ютерних методів ідентифікації параметрів моделі.

У роботі з цією метою пропонується використання метаевристичного алгоритму рою частинок [8].

Математична модель і чисельний метод розв’язання крайової задачі. Розглянемо задачу моделювання динаміки аномального процесу конвективної дифузії домішок у випадку плоско-вертикальної усталеної фільтрації з вільною поверхнею з річок, каналів чи накопичувачів промислових стоків [7]. Математична модель процесу поширення забруднень описується наступною крайовою задачею:

$$\sigma D_{t,g}^{(\beta)}C = \frac{\partial}{\partial x}\left(D\frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(D\frac{\partial C}{\partial y} \right) - \upsilon_x \frac{\partial C}{\partial x} - \upsilon_y \frac{\partial C}{\partial y}, \quad (1)$$

$$C|_{AC} = C_0, \ \frac{\partial C}{\partial n}|_{AB,\,CB} = 0, \ C|_{t=0} = 0, \quad (2)$$

де $C(x, y, t)$ — концентрація речовини, σ — пористість середовища, $\upsilon = (\upsilon_x, \upsilon_y)$ — швидкість фільтрації, $D(x, y)$ — коефіцієнт конвективної дифузії, $D_{t,g}^{(\beta)}C$ — похідна Капуто–Герасимова по змінній t порядку $\beta\left(0 < \beta < 1\right)$ від функції C за функцією g [9], C_0 — концентрація на вході фільтраційного потоку AC, n — зовнішня нормаль, AB — вісь симетрії потоку, CB — крива депресії [5].

Оскільки область фільтрації G_z є областю з частково невідомою межею, розв’язок задачі (1), (2) будемо шукати в області комплексного потенціалу течії $G_\omega = \left\{ (\varphi, \psi) : 0 < \varphi < +\infty, 0 < \psi < Q \right\}$ [5]. Тоді, крайова задача (1), (2) приймає вигляд

$$\sigma D_{t,g}^{(\beta)}C(\varphi,\psi,t) = \upsilon^2(\varphi,\psi)\left[\frac{\partial}{\partial \varphi}\left(D\frac{\partial C}{\partial \varphi} \right) + \frac{\partial}{\partial \psi}\left(D\frac{\partial C}{\partial \psi} \right) - \frac{\partial C}{\partial \varphi} \right], \quad (3)$$

$$((\varphi,\psi,t) \in G_\omega \times (0, +\infty)),$$

$$C\,|_{\varphi=0}=C_0,\ \frac{\partial C}{\partial \psi}\,|_{\psi=0,\,\psi=Q}=0,\ C\,|_{t=0}=0\ , \tag{4}$$

де $\upsilon^2(\varphi,\psi)$ — відома функція, що визначається згідно [5, 10].

Ефективний чисельний метод розв'язання крайової задачі (3), (4) базується на використанні локально-одновимірної різницевої схеми [11] із відповідними граничними умовами:

$$\frac{\sigma}{2}\Delta_t^{(\beta)}C^{j+1/2}=\upsilon^2\left((aC_{\bar\varphi}^{j+1/2})_{\varphi}-C_{\overset{0}{\varphi}}^{j+1/2}\right),$$

$$\frac{\sigma}{2}\Delta_t^{(\beta)}C^{j+1}=\upsilon^2\left(aC_{\bar\psi}^{j+1}\right)_{\psi},$$

де C — сіткова функція і використовуються загальноприйняті позначення теорії різницевих схем [11], $\Delta_t^{(\beta)}C$ — різницевий аналог похідної $D_{t,g}^{(\beta)}C$ [7].

Після отримання розв'язку задачі в області комплексного потенціалу, перехід у фізичну область здійснюється згідно [10].

Задача ідентифікації параметрів і метод її розв'язання. Подаючи пробну функцію $g(t)$ у визначенні дробової похідної Капуто–Герасимова в степеневому вигляді $g(t)=t^{\gamma}$, задачу ідентифікації параметрів β,γ сформулюємо так.

Нехай відомі значення концентрації C_i, $i=1,\ldots,N$ в моменти часу T_i в точках (x_i, y_i).

Необхідно знайти значення параметрів β,γ, які мінімізують

$$F(C)=\sum_{i=1}^{N}\left(C(x_i,y_i,T_i)-C_i\right)^2,$$

де $C(x,y,t)$ — розв'язок крайової задачі (1), (2).

Враховуючи складність задачі, фіксовану кількість і неперервність параметрів, що визначаються, пропонується розв'язувати її метаевристичним алгоритмом рою частинок [8], який коротко може бути описаним наступним чином:

- позначимо як S кількість частинок в рої; ξ_k, $k=1,\ldots,S$ — координати частинки *k*, значення яких відповідають значенням параметрів, що визначаються; v_k — швидкість частинки k; p_k — координати частинки *k*, для яких отримано мінімальне значення цільової функції $F(C)$; η — координати, для яких отримано мінімальне значення цільової функції серед усіх частинок рою; $\omega,\varphi_p,\varphi_g$ — параметри алгоритму;

- на стадії ініціалізації початкові координати частинок генеруються випадковим чином, беручи до уваги обмеження щодо значень параметрів, що визначаються. Швидкості приймаються рівними нулю;
- поки не досягнуто заданого максимального числа ітерацій N_m, виконується умова $\eta > \varepsilon_1$, де ε_1 — задана константа, а різниця між найбільшим і найменшим значеннями цільової функції для частинок рою перевищує задане число ε_2, на ітерації j алгоритму для кожної частинки k
- генеруються випадкові значення $r_P, r_g \in [0,1]$;
- модифікується швидкість:
$$v_k^{(j+1)} = \omega \cdot v_k^{(j)} + \varphi_p r_p (p_k^{(j)} - \xi_k^{(j)}) + \varphi_g r_g (\eta^{(j)} - \xi_k^{(j)});$$
- модифікуються координати частинки: $\xi_k^{(j+1)} = \xi_k^{(j)} + v_k^{(j)}$;
- обчислюється значення цільової функції й оновлюється p_k та η.

Обчислювальний експеримент з ідентифікації параметрів моделі (1), (2) здійснювався наступним чином. Значення концентрації C_i, які використовувались для ідентифікації параметрів β, γ дробової похідної при $g(t) = t^\gamma$, були отримані з розв'язку [7] прямої задачі (1), (2) для $t = 0.4$ при $\beta = 0.84, \gamma = 0.9$ і $\gamma = 1.0$ в точках (6.026, 3.151), (6.126, 5.502), (6.024, 7.940), що відповідають вузлам сітки (10, 28), (11, 21) і (12, 16). Параметри методу рою частинок приймалися наступними: $S = 20$, $\omega = \varphi_p = \varphi_g = 0.2$, $N_m = 25$, $\varepsilon_1 = 10^{-14}$, $\varepsilon_2 = 10^{-12}$, $\beta \in [0.8,1]$, $\gamma \in [0.1,1.9]$. Отримані результати ідентифікації параметрів для випадків, коли здійснювався пошук як обох параметрів β, γ, так і тільки порядку похідної β, наведені в таблиці.

Таблиця

Результати ідентифікації параметрів моделі

x	y	C_i отримані при $\beta = 0.84$, $\gamma = 0.9$			C_i отримані при $\beta = 0.84$, $\gamma = 1.0$		
		C_i	Пошук β при $\gamma = 1.0$: $\beta = 0.96$	Пошук β, γ: $\beta = 0.835$ $\gamma = 0.904$	C_i	Пошук β при $\gamma = 1.0$: $\beta = 0.96$	Пошук β, γ: $\beta = 0.86$ $\gamma = 0.96$
6.026	3.151	7.98e-2	8.00e-2	7.97e-2	5.70e-2	5.69e-2	5.69e-2
6.126	5.502	7.77e-4	5.14e-4	6.30e-4	4.60e-4	4.79e-4	4.42e-4
6.024	7.940	6.71e-5	3.96e-5	5.13e-5	3.79e-5	4.00e-5	3.61e-5

Продовження таблиці

Значення цільової функції $F(C)$	–	9.90e-8	3.18e-8	–	4.13e-10	6.44e-10
Середня відносна похибка	–	24.9 %	14.1 %	–	3.2 %	2.8 %

Отримані результати ідентифікації параметрів розглядуваної моделі демонструють адекватність запропонованої методики. У випадку, коли методом рою частинок відбувається пошук β при фіксованому $\gamma = 1.0$, що не відповідає значенню $\gamma = 0.9$, при якому були отримані значення C_i, знайдене значення β істотно відрізняється від вихідного. Мінімальне знайдене значення цільової функції і середня відносна похибка в цьому випадку в ~ 2 рази вище, ніж при пошуку обох параметрів розглядуваної дробової похідної. Це показує некоректність опису за допомогою класичної похідної Капуто–Герасимова динаміки процесу, аналогічного представленому крайовою задачею (1), (2).

При збільшенні кількості параметрів, що ідентифікуються, якість отриманого розв'язку погіршується при незмінних значеннях параметрів алгоритму рою частинок.

Висновки. Таким чином, для адаптації моделі до реальних умов, значення її параметрів можуть бути ідентифіковані на основі вимірів концентрації речовини методом рою частинок. Проведені обчислювальні експерименти підтверджують на прикладі модельної задачі ефективність даного алгоритму для визначення параметрів похідних дробового порядку в дробово-диференціальних моделях перенесення.

Список використаних джерел:

1. Гладкий А. В., Ляшко И. И., Мистецкий Г. Е. Алгоритмизация и численный расчёт фильтрационных схем. Киев : Вища школа, 1981. 288 с.
2. Ляшко И. И., Демченко Л. И., Мистецкий Г. Е. Численное решение задач тепло- и массопереноса в пористых средах. Киев : Наукова думка, 1991. 264 с.
3. Мистецкий Г. Е. Гидростроительство. Автоматизация расчета массопереноса в почвогрунтах. Киев : Будівельник, 1985. 136 с.
4. Kilbas A. A., Srivastava H. M., Trujillo J. J. Theory and applications of fractional differential equations. Amsterdam : Elsevier, 2006. 523 p.
5. Bulavatsky V. M. Mathematical modeling of dynamics of the process of filtration convection diffusion under the condition of time nonlocality. *Journal of Automation and Information Science*. 2012. 44, N 2. P. 13–22.
6. Булавацкий В. М., Кривонос Ю. Г. Математические модели с функцией контроля для исследования дробно-дифференциальной динамики геомиграционных процессов. *Проблемы управления и информатики.* 2014. № 3. С. 138–147.

7. Богаенко В. А., Булавацкий В. М. Компьютерное моделирование динамики процесса миграции растворимых веществ при фильтрации грунтовых вод со свободной поверхностью на основе дробно-дифференциального подхода. *Доповіді НАНУ.* 2018. № 12. С. 21–29.
8. Zhang Y. A. Comprehensive Survey on Particle Swarm Optimization Algorithm and Its Applications. *Mathematical Problems in Engineering.* 2015. 931256.
9. Almeida R. A. Caputo fractional derivative of a function with respect to another function. *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation.* 2017. № 44. P. 460–481.
10. Полубаринова-Кочина П. Я. Теория движения грунтовых вод. М. : Наука, 1977. 664 с.
11. Самарський А. А., Вабищевич П. Н. Вычислительная теплопередача. М. : Едиториал УРСС. 2003. 784 с.

IDENTIFICATION OF PARAMETERS OF ONE FRACTIONAL MODEL OF SOLUBLE SUBSTANCES MIGRATION

The paper deals with the problem of identification of model parameters in the case of mathematical modeling of fractional-differential dynamics of anomalous process of convective diffusion of soluble substances under steady-state profile groundwater filtration with a free surface. We describe the process of mass transfer using a model containing a generalized fractional derivative of Caputo-Gerasimov with respect to the time variable while the filtration process is considered in the potential velocity field. Since the filtration domain is a domain with a partially unknown boundary, the solution of the problem is performed using an anticipatory transition to a completely determined complex potential domain with a known characteristic flow function. We pose the problem of identification of the values of the parameters of a generalized fractional derivative based on the measurements of substance concentration. Such an approach allows us to more adequately describe the processes of mass transfer in environments with a complex spatial and temporal structure, including soils, in the situation of significant costs needed for their exact geophysical analysis. Taking into account the complexity of the solution of inverse problems for differential equations with fractional derivatives, the fixed quantity and continuity of optimized parameters, it is proposed to use a meta-heuristic particle swarm optimization algorithm for their identification. The paper briefly describes the finite-difference method of the approximate solution of the direct problem, poses the problem of parameters identification, and describes the modification of the used particle swarm optimization algorithm. We present the results of computer experiments that show the efficiency of the particle swarm optimization algorithm for determining the parameters of the fractional derivative, as well as the fact that, depending on the type of functional parameter of the generalized fractional derivative, the model allows describing both «ultra-slow» and «ultra-fast» diffusion modes.

Key words: *anomalous convective-diffusion processes dynamics, steady-state profile groundwater filtration, fractional differential mathematical models, generalized Caputo-Gerasimov derivative, identification of parameters, particle swarm optimization.*

Одержано 04.02.2019