Ссылка на статью:
// Ученые записки УлГУ. Серия Математика и информационные технологии. 2024, № 2, с. 20–28.
Поступила: 07.11.2024
Окончательный вариант: 22.12.2024

УДК 681.5.015.4, 004.94

Построение дискретной модели уравнения диффузии в пространстве состояний на основе конечно-разностной схемы четвертого порядка

Галушкина Д. В.[1], ***Кувшинова А. Н.***[2,*]

[*]kuvanulspu@yandex.ru
[1]УлГУ, Ульяновск, Россия
[2]УлГПУ им. И.Н. Ульянова, Ульяновск, Россия

В статье рассмотрена одномерная модель диффузии с граничными условиями первого рода. Предложена новая дискретная линейная модель в пространстве состояний, полученная дискретизацией исходной непрерывной модели на основе конечно-разностной схемы четвертого порядка точности по пространственной переменной. Рассмотрены различные подходы к идентификации неизвестных параметров построенной модели на основе алгоритмов рекуррентной дискретной фильтрации в зависимости от наличия априорной информации.

Ключевые слова: *уравнение диффузии, дискретная линейная стохастическая система, конечно-разностная схема четвертого порядка, алгоритмы дискретной фильтрации*

Введение и постановка задачи

Одной из современных проблем области охраны окружающей среды является интенсивное загрязнение атмосферы, почвы, воды различными антропогенными источниками. Прогнозирование качества окружающей среды и оценка возможного влияния на него различных видов человеческой деятельности строится, как правило, на математическом моделировании процессов загрязнения в воздушной и водной средах. Существует широкий спектр математических моделей, описывающих процессы переноса веществ в воздухе, водоемах и подземных водах. Одним из механизмов переноса вещества в той или иной среде является диффузия.

Рассмотрим одномерную модель диффузии [1], описываемую уравнением (1) с начальным условием (2) и граничными условиями первого рода (3):

$$\frac{\partial c(x,t)}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 c(x,t)}{\partial x^2}, \tag{1}$$

$$c(x,0) = \varphi(x). \tag{2}$$

$$\begin{cases} c(a,t) = f(t), \\ c(b,t) = g(t). \end{cases} \tag{3}$$

$$x \in [a;b], t \in [0;T]$$

где $c(x,t)$ — искомая функция, x — пространственная координата, t — время, α — коэффициент диффузии, $\varphi(x)$, $f(x)$ и $g(x)$ — заданные функции, a и b — границы рассматриваемой области (отрезка).

При решении широкого круга прикладных проблем экологии, геофизики и в других областях нередко возникает задача идентификации коэффициентов уравнения в модели диффузии или конвекции-диффузии. В зависимости от рассматриваемого уравнения и граничных условий для этого могут быть использованы различные методы. Например, в работе [2] для решения задачи идентификации скорости конвекции и коэффициента диффузии в модели конвективно-диффузионного переноса рассматривается градиентный алгоритм оптимизации критерия идентификации, значения которого вычисляются на основе величин, вычисляемых классическим фильтром Калмана, а в работе [3] применяется алгоритм параметрической идентификации на основе численно эффективных модификаций фильтра Калмана. В работе [4] для идентификации граничных условий модели конвективно-диффузионного переноса было предложено использовать рекуррентный алгоритм одновременного оценивания векторов состояния и входных воздействий Гиллейнса – Де-Мора. Во всех перечисленных работах дискретизация исходной модели осуществлялась на основе конечно-разностных схем второго порядка точности по пространственной переменной.

В данной работе для параметрической идентификации уравнения диффузии предлагается использовать методы рекуррентной дискретной фильтрации на основе конечно-разностной схемы четвертого порядка.

1. Дискретизация модели

Для решения поставленной задачи перейдем от непрерывной модели (1)–(3) к дискретной линейной стохастической системе в пространстве состояний:

$$\begin{cases} c_k = F_{k-1}(\theta)c_{k-1} + B_{k-1}u_{k-1}, & (4) \\ z_k = H_k c_k + \xi_k, \quad k = 1, 2, \ldots, K, & (5) \end{cases}$$

где $\theta \in \mathbb{R}^p$ — неизвестный (в общем случае, векторный) параметр модели, $c_k \in \mathbb{R}^n$ — вектор состояния системы, $u_k \in \mathbb{R}^r$ — вектор входных воздействий (управления), $z_k \in \mathbb{R}^m$ — вектор измерений, $\xi_k \in \mathbb{R}^m$ — шум в измерителе. Шум ξ_k образует независимую нормально распределенную последовательность с нулевым математическим ожиданием и ковариационной матрицей $R_k > 0$. В данной системе первое уравнение называется уравнением объекта, а второе — уравнением измерений.

Зададим в рассматриваемой пространственно-временной области конечно-разностную сетку $\{(x_i, t_k) | i = 0, 1, \ldots, N, k = 0, 1, \ldots, K\}$, где

$$x_i = a + i\Delta x, t_k = k\Delta t, \quad \Delta x = \frac{b-a}{N-1}, \Delta t = \frac{T}{K-1}.$$

Обозначим: $c_i^k = c(x_i, t_k)$, $\varphi_i = \varphi(x_i)$, $f^k = f(t_k)$, $g^k = g(t_k)$.

Для перехода от рассматриваемого уравнения в частных производных к системе разностных уравнений во внутренних точках отрезка применим конечно-разностную схему четвертого порядка точности [5] на основе шаблона (1,5), приведенного на рисунке 1.

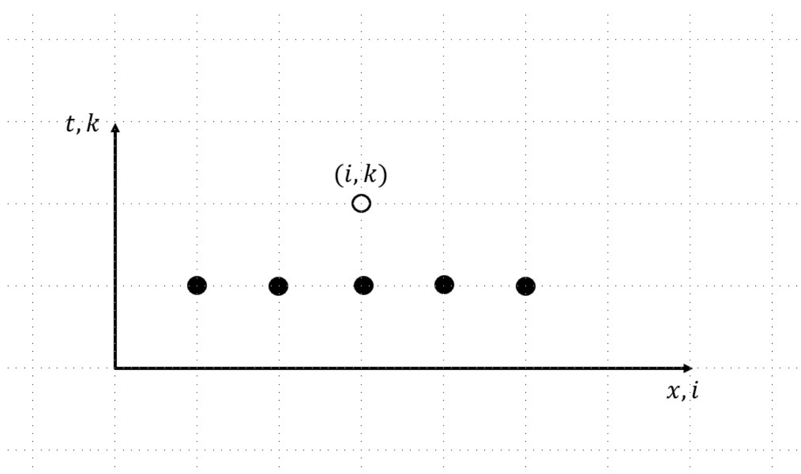

Рис. 1. Шаблон (1,5)

Пусть

$$r = \alpha \frac{\Delta t}{\Delta x^2}, \tag{6}$$

тогда дискретизация уравнения (1) в точках $i = 2, 3, \ldots, N-2$, имеет следующий вид:

$$12c_i^k = r(6r-1)(c_{i-2}^{k-1} + c_{i+2}^{k-1}) + 8r(2-3r)(c_{i-1}^{k-1} + c_{i+1}^{k-1}) + 6(2-5r+6r^2)c_i^{k-1}. \quad (7)$$

Уравнение (7) является уравнением четвертого порядка точности по переменной x, условие устойчивости для которого определяется выражением $r \leq \frac{2}{3}$.

Заметим, что использование уравнения (7) для точек расположенных непосредственно рядом с границами отрезка (то есть для $i = 1, N-1$) невозможно. Однако, для точек $i = 1$ и $i = N-1$ возможно использование неявного метода Крэндалла [6] с шаблоном (3,3), приведенном на рисунке 2, который при известных граничных условиях дает явную формулу:

$$2(5+6r)c_i^k = (6r-1)(c_{i-1}^k + c_{i+1}^k) + (1+6r)(c_{i-1}^{k-1} + c_{i+1}^{k-1}) + 2(5-6r)c_i^{k-1}. \quad (8)$$

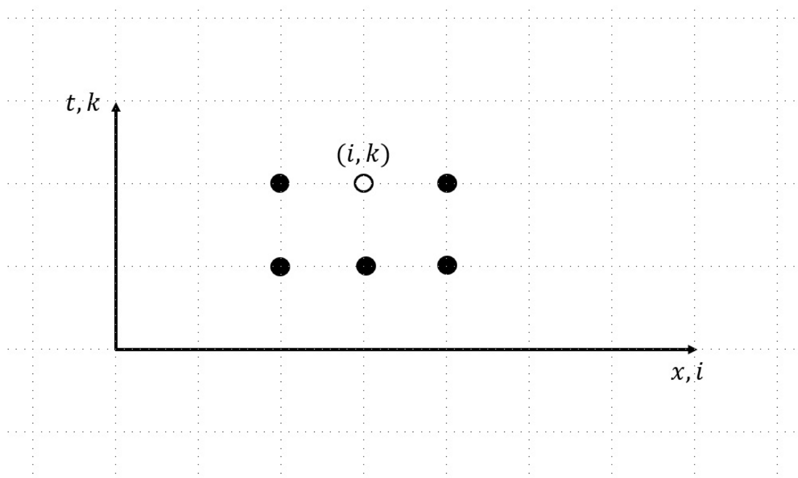

Рис. 2. Шаблон (3,3)

Условие устойчивости уравнения (9) задается неравенством $0 < r \leq 0,95$.

Пусть $a_1 = \frac{6r-1}{2(5+6r)}$, $a_2 = \frac{1+6r}{2(5+6r)}$, $a_3 = \frac{2(5-6r)}{2(5+6r)}$, $a_4 = \frac{r(6r-1)}{12}$, $a_5 = \frac{8r(2-3r)}{12}$, $a_6 = \frac{6(2-5r+6r^2)}{12}$, тогда уравнение (8) можно переписать следующим образом:

$$c_i^k = a_1 c_{i-1}^k + a_2 c_{i-1}^{k-1} + a_3 c_i^{k-1} + a_2 c_{i+1}^{k-1} + a_1 c_{i+1}^k, \quad i = 1, N-1, \quad (9)$$

а уравнение (7) в виде

$$c_i^k = a_4 c_{i-2}^{k-1} + a_5 c_{i-1}^{k-1} + a_6 c_i^{k-1} + a_5 c_{i+1}^{k-1} + a_4 c_{i+2}^k, \quad i = 2, 3, \ldots, N-2. \quad (10)$$

Для $i = 1$ получим:

$$c_1^k = a_1 c_0^k + a_2 c_0^{k-1} + a_3 c_1^{k-1} + a_2 c_2^{k-1} + a_1 c_2^k = a_1 f^k + a_2 f^{k-1} + a_3 c_1^{k-1} + a_2 c_2^{k-1} + a_1 c_2^k. \quad (11)$$

Для $i = N-1$ получим:

$$c_{N-1}^k = a_1 c_{N-2}^k + a_2 c_{N-2}^{k-1} + a_3 c_{N-1}^{k-1} + a_2 c_N^{k-1} + a_1 c_N^k = a_1 c_{N-2}^k + a_2 c_{N-2}^{k-1} + a_3 c_{N-1}^{k-1} + a_2 g^{k-1} + a_1 g^k. \quad (12)$$

Выразив из формулы (10) c_2^k и подставив его в формулу (11), получим:

$$c_1^k = (a_3 + a_1 a_5) c_1^{k-1} + (a_2 + a_1 a_6) c_2^{k-1} + a_1 a_5 c_3^{k-1} + a_1 a_4 c_4^{k-1} + a_1 f^k + (a_2 + a_1 a_4) f^{k-1}. \quad (13)$$

Выразив из формулы (10) c_{N-2}^k и подставив его в формулу (12), получим:

$$c_{N-1}^k = a_1 a_4 c_{N-4}^{k-1} + a_1 a_5 c_{N-3}^{k-1} + (a_2 + a_1 a_6) c_{N-2}^{k-1} + (a_3 + a_1 a_5) c_{N-1}^{k-1} + (a_2 + a_1 a_4) g^{k-1} + a_1 g^k. \quad (14)$$

Искомая дискретная линейная система для модели (1)–(3) может быть записана в следующем виде:

$$\underbrace{\begin{bmatrix} c_1^k \\ c_2^k \\ c_3^k \\ \vdots \\ c_{N-3}^k \\ c_{N-2}^k \\ c_{N-1}^k \end{bmatrix}}_{c_k} = \underbrace{\begin{bmatrix} a_3 + a_1 a_5 & a_2 + a_1 a_6 & a_1 a_5 & a_1 a_4 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ a_5 & a_6 & a_5 & a_4 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ a_4 & a_5 & a_6 & a_5 & a_4 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & a_6 & a_5 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & a_5 & a_6 & a_5 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & a_1 a_5 & a_2 + a_1 a_6 & a_3 + a_1 a_5 \end{bmatrix}}_{F_{k-1}} \underbrace{\begin{bmatrix} c_1^{k-1} \\ c_2^{k-1} \\ c_3^{k-1} \\ \vdots \\ c_{N-3}^{k-1} \\ c_{N-2}^{k-1} \\ c_{N-1}^{k-1} \end{bmatrix}}_{c_{k-1}}$$

$$+ \underbrace{\begin{bmatrix} a_2 + a_1 a_4 & a_1 & 0 & 0 \\ a_4 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & a_4 \\ 0 & 0 & a_1 & a_2 + a_1 a_4 \end{bmatrix}}_{B_{k-1}} \underbrace{\begin{bmatrix} f^{k-1} \\ f^k \\ g^k \\ g^{k-1} \end{bmatrix}}_{u_{k-1}}, \; k = 1, 2, \dots, K. \quad (15)$$

К уравнению объекта добавим уравнение зашумленных измерений

$$z_k = H_k c_k + \xi_k, \quad k = 1, 2, \dots, K. \quad (16)$$

В полученной системе компоненты вектора состояния c_k соответствуют всем внутренним узлам пространственной сетки, а вектор входных воздействий u_k является четырехмерным.

2. Методы параметрической идентификации

Для идентификации параметров полученной системы (15)–(16) могут быть использованы методы, основанные на применении алгоритмов рекуррентной дискретной фильтрации. Выбор того или иного метода зависит от наличия априорной информации о модели. Рассмотрим следующие случаи:

1. Граничные условия известны, коэффициенты уравнения неизвестны. В этом случае могут быть использованы методы, основанные на применении классического фильтра Калмана или его численно устойчивых модификаций (см., например, [2], [3]).

2. Граничные условия неизвестны, коэффициенты уравнения известны. В этом случае могут быть использованы методы, основанные на применении алгоритма Гиллейнса–Де-Мора (см., например, [4]).

3. Граничные условия неизвестны, коэффициенты уравнения неизвестны. В этом случае может быть использован двухэтапный метод идентификации коэффициентов уравнения и граничных условий [8] или метод их совместной идентификации [9]. Пример применения предложенного подхода к задаче идентификации параметров уравнения реакции-диффузии приведен в [7].

3. Пример

В качестве примера разберем случай минимального допустимого значения $N = 4$, то есть случай, когда $i = 0, 1, 2, 3, 4$. Векторы c_1^k и c_3^k будут вычисляться по формулам (11) и (14) соответственно, c_2^k по формуле (10), c_0^k и c_4^k совпадают с граничными условиями f^k и g^k соответственно, а c_0^{k-1} и c_4^{k-1} совпадают с граничными условиями f^{k-1} и g^{k-1}. В результате получим:

$$c_1^k = (a_3 + a_1a_5)c_1^{k-1} + (a_2 + a_1a_6)c_2^{k-1} + a_1a_5c_3^{k-1} + a_1a_4g^{k-1} + a_1f^k + (a_2 + a_1a_4)f^{k-1}, \tag{17}$$

$$c_2^k = a_4f^{k-1} + a_5c_1^{k-1} + a_6c_2^{k-1} + a_5c_3^{k-1} + a_4g^{k-1}, \tag{18}$$

$$c_3^k = a_1a_4f^{k-1} + a_1a_5c_1^{k-1} + (a_2 + a_1a_6)c_2^{k-1} + (a_3 + a_1a_5)c_3^{k-1} + (a_2 + a_1a_4)g^{k-1} + a_1g^k. \tag{19}$$

Уравнение объекта для рассматриваемого случая будет иметь вид:

$$\begin{bmatrix} c_1^k \\ c_2^k \\ c_3^k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_3 + a_1a_5 & a_2 + a_1a_6 & a_1a_5 \\ a_5 & a_6 & a_5 \\ a_1a_5 & a_1a_6 + a_2 & a_1a_5 + a_3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1^{k-1} \\ c_2^{k-1} \\ c_3^{k-1} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} a_2 + a_1a_4 & a_1 & 0 & a_1a_4 \\ a_4 & 0 & 0 & a_4 \\ a_1a_4 & 0 & a_1 & a_2 + a_1a_4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} f^{k-1} \\ f^k \\ g^k \\ g^{k-1} \end{bmatrix} \tag{20}$$

К уравнению объекта добавим уравнение измерений вида:

$$z_k = H_kc_k + \xi_k, \tag{21}$$

где $H_k = I_3$.

Перейдем к числовым значениям и зададим в пространственно-временной области $[0; 1] \times [0; 1]$ конечно-разностную сетку с 5 узлами по оси Ox (то есть $\Delta x = 0.25$) и зафиксируем

$\Delta t = 0.04$. Тогда вектор состояния будет состоять из 3 внутренних узлов пространственной сетки. Матрицу измерений зададим в виде $H = I_3$.

Если коэффициент α известен и равен, например, 1, то согласно (6) получаем $r = 0.64$ и условие устойчивости $r \le \frac{2}{3}$ выполняется.

Система (20) в этом случае будет иметь вид:

$$\begin{bmatrix} c_1^k \\ c_2^k \\ c_3^k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.1367 & 0.3748 & 0.0055 \\ 0.0341 & 0.6288 & 0.0341 \\ 0.0055 & 0.3748 & 0.1367 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1^{k-1} \\ c_2^{k-1} \\ c_3^{k-1} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0.2981 & 0.1606 & 0 & 0.0243 \\ 0.1515 & 0 & 0 & 0.1515 \\ 0.0243 & 0 & 0.1606 & 0.2981 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} f^{k-1} \\ f^k \\ g^k \\ g^{k-1} \end{bmatrix}. \qquad (22)$$

Полученная система может быть использована для идентификации граничных условий с помощью алгоритма Гиллейнса – Де-Мора.

Если же коэффициент диффузии неизвестен, то для его идентификации могут быть применены все описанные в предыдущем пункте методы. При этом, для зафиксированных значений $\Delta x = 0.25$, $\Delta t = 0.04$ из условия устойчивости получаем область идентификации α в виде промежутка $(0; 1.041]$.

Заключение

В работе построена дискретная линейная стохастическая модель в пространстве состояний для одномерного уравнения диффузии на основе конечно-разностных схем четвертого порядка точности по пространственной переменной.

В зависимости от наличия априорной информации рассмотрены различные подходы к решению задачи идентификации параметров построенной модели на основе алгоритмов дискретной фильтрации калмановского типа и Гиллейнса – Де-Мора.

Дальнейшие исследования будут направлены на анализ свойств построенной модели и программную реализацию алгоритмов параметрической идентификации.

Список литературы

1. Фарлоу С.Д. *Уравнения с частными производными для научных работников и инженеров.* М. : Мир, 1985. 383 р.

2. Кувшинова А.Н., Цыганов А.В., Цыганова Ю.В., Тапиа Гарса У.Р. Алгоритм численной идентификации параметров в модели конвективно-диффузионного переноса // *Информационные технологии и нанотехнологии (ИТНТ-2020). Сборник трудов по материалам VI Международной конференции и молодежной школы* (г. Самара, 26–29 мая): в 4 т. Самар.нац.-исслед. ун-т им. С. П. Королева (Самар. ун-т), Ин-т систем. обраб. изобр. РАН-фил. ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН; [под ред. В. А. Соболева]. Т. 3. Математическое моделирование физико-технических процессов и систем. Самара: Изд-во Самар. ун-та, 2020. С. 825–832.

3. Кувшинова А.Н., Цыганов А.В., Цыганова Ю.В. Математическое моделирование процесса параметрической идентификации моделей конвективно-диффузионного переноса с применением SVD-фильтра Калмана // *Вестн. Сам. гос. техн. ун-та. Сер. Физ.-мат. науки.* 2021, т. 25, № 4, с. 716–737.

4. Галушкина Д.В., Кувшинова А.Н., Цыганова Ю.В. Численная идентификация граничных условий в модели реакции-диффузии // *Информационные технологии и нанотехнологии (ИТНТ-2023): сборник трудов по материалам IX Международной конференции и молодежной школы* (г. Самара, 17–23 апреля 2023 г.). Т. 5. Науки о данных. Самара: Изд-во Самарского ун-та, 2023. С. 050322.

5. Hayman K.J. *Difference Methods for the Diffusion Equation*: thesis submitted for the degree of doctor of philosophy. Kenneth John Hayman; Department of Applied Mathematics University of Adelaide. Adelaide, 1988. 267 p.

6. Crandall S.H. An Optimum Implicit Recurrence Formula for the Heat Conduction Equation // *Quarterly of Applied Mathematics.* 1955, v. 13, no. 3, p. 318–320.

7. Galushkina D., Kuvshinova A., Tsyganova Y. Numerical Identification of Reaction-Diffusion Model Parameters under Unknown Boundary Conditions // *X International Conference on Information Technology and Nanotechnology (ITNT)*. Samara, Russian Federation, 2024. P. 1-4.

8. Цыганова Ю.В., Цыганов А.В., Кувшинова А.Н., Галушкина Д.В. Идентификация параметров модели конвекции-диффузии-реакции и неизвестных граничных условий при наличии случайных помех в измерениях // *Вестн. Сам. гос. техн. ун-та. Сер. Физ.-мат. науки.* 2024, т. 28, № 2, с. 345–366.

9. Tsyganova Y., Ts yganov A.Parameter identification of the linear discrete-time stochastic systems with unknown exogenous inputs // *Cybernetics and Physics.* 2023, v. 12, no. 3, p. 219–229.

Construction of a discrete model of the diffusion equation in the state space based on a finite-difference scheme of the fourth order

Galushkina, D. V.[1], ***Kuvshinova, A. N.***[2,*]

*kuvanulspu@yandex.ru

[1]Ulyanovsk State University, Russia

[2]Ul'yanovsk State Pedagogical University, Russia

The paper considers a one-dimensional diffusion model with boundary conditions of the first kind. A new discrete linear model in the state space obtained by discretization of the original continuous model on the basis of a finite-difference scheme of the fourth order of accuracy on the spatial variable is proposed. Various approaches to the identification of unknown parameters of the constructed model based on recurrent discrete filtering algorithms depending on the availability of a priori information are considered.

Keywords: *diffusion equation, discrete linear stochastic system, finite difference scheme of the fourth order, discrete filtering algorithms*