Ссылка на статью:
// Ученые записки УлГУ. Сер. Математика и информационные технологии. 2023, № 2, с. 11–18.
Поступила: 16.11.2023
Окончательный вариант: 16.11.2023

УДК 681.5.015.4, 004.94

Квадратно-корневой алгоритм численной идентификации граничных условий модели конвекции-диффузии-реакции

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 рассматривается метод численной идентификации граничных условий математической модели конвекции-диффузии-реакции по данным зашумленных измерений значений искомой функции. Для решения поставленной задачи осуществляется переход от исходной непрерывной модели с уравнением в частных производных к дискретной линейной стохастической системе в пространстве состояний, в которой функции, входящие в граничные условия, представлены в виде неизвестного вектора входных воздействий. К полученной системе применяется квадратно-корневая модификация рекуррентного алгоритма одновременного оценивания векторов состояния и входных воздействий Гиллейнса – Де-Мора. Приводятся результаты численного эксперимента, подтверждающие практическую применимость предложенного подхода.

Ключевые слова: *модель конвекции-диффузии-реакции, дискретная линейная стохастическая система, алгоритм Гиллейнса – Де-Мора, квадратно-корневой алгоритм.*

Введение и постановка задачи

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

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

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

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

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

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

Рассмотрим задачу определения значений функций $f(t)$ и $g(t)$, входящих в граничные условия (3), по результатам зашумленных измерений значений функции (x,t) в отдельных точках рассматриваемого отрезка в последовательные моменты времени.

Одним из актуальных методов решения граничных обратных задач являются методы параметрической идентификации, основанные на применении рекуррентных алгоритмов дискретной фильтрации [2]. Применим данный подход для идентификации граничных условий модели (1)—(3).

1. Дискретизация модели

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

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

где $c_k \in \mathbb{R}^n$ — 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: $c_i^k = c(x_i,t_k)$, $\varphi_i = \varphi(x_i)$, $f^k = f(t_k)$, $g^k = g(t_k)$. Заменяя частные производные в уравнении (1) их конечно-разностными аппроксимациями, получаем следующую систему уравнений

$$\frac{c_i^k - c_i^{k-1}}{\Delta t} + v\frac{c_{i+1}^{k-1} - c_{i-1}^{k-1}}{2\Delta x} = \alpha\frac{c_{i+1}^{k-1} - 2c_i^{k-1} + c_{i-1}^{k-1}}{\Delta x^2} - \beta c_i^{k-1}, \tag{6}$$

$$i = 1, 2, \ldots, N-1,\ \ k = 1, 2, \ldots, K,$$

$$c_i^0 = \varphi_i, \quad i = 0, 1, \ldots, N,$$

$$c_0^k = f^k,\ c_N^k = g^k, \quad k = 0, 1, \ldots, K.$$

Из (6) следует, что значение функции $c(x,t)$ в узловой точке k-го временного ряда может быть выражено через ее значения в трех точках $(k-1)$-го временного ряда:

$$c_i^k = (r_1 + r_3)c_{i-1}^{k-1} + (1 - r_2 - r_4)c_i^{k-1} + (r_1 - r_3)c_{i+1}^{k-1}, \tag{7}$$

где $r_1 = \frac{\alpha\Delta t}{\Delta x^2}$, $r_2 = \beta\Delta t$, $r_3 = \frac{v\Delta t}{2\Delta x}$, $r_4 = \frac{2\Delta t}{\Delta x^2}$.

Перепишем (7) в виде

$$c_i^k = a_1 c_{i-1}^{k-1} + a_2 c_i^{k-1} + a_3 c_{i+1}^{k-1}, \quad i = 1, 2, \ldots, N-1,\ \ k = 1, 2, \ldots, K,$$

где $a_1 = r_1 + r_3$, $a_2 = 1 - r_2 - r_4$, $a_3 = r_1 - r_3$. Тогда искомая дискретная линейная система длz модели (1)—(3) может быть записана в следующем виде:

$$\underbrace{\begin{bmatrix} c_1^k \\ c_2^k \\ c_3^k \\ \vdots \\ c_{N-3}^k \\ c_{N-2}^k \\ c_{N-1}^k \end{bmatrix}}_{c_k} = \underbrace{\begin{bmatrix} a_2 & a_3 & 0 & \ldots & 0 & 0 & 0 \\ a_1 & a_2 & a_3 & \ldots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & a_1 & a_2 & \ldots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \ldots & a_2 & a_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \ldots & a_1 & a_2 & a_3 \\ 0 & 0 & 0 & \ldots & 0 & a_1 & a_2 \end{bmatrix}}_{F_{k-1}} \underbrace{\begin{bmatrix} c_1^{k-1} \\ c_2^{k-1} \\ c_3^{k-1} \\ \vdots \\ c_{N-3}^{k-1} \\ c_{N-2}^{k-1} \\ c_{N-1}^{k-1} \end{bmatrix}}_{c_{k-1}} + \underbrace{\begin{bmatrix} a_1 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ \vdots & \vdots \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & a_3 \end{bmatrix}}_{B_{k-1}} \underbrace{\begin{bmatrix} f^{k-1} \\ g^{k-1} \end{bmatrix}}_{u_{k-1}},$$

$$k = 1, 2, \ldots, K. \tag{8}$$

К уравнению объекта добавим уравнение зашумленных измерений

$$z_k = H_k c_k + \xi_k, \quad k = 1, 2, \ldots, K. \tag{9}$$

К полученной системе применим квадратно-корневую модификацию алгоритма Гиллейнса – Де-Мора для одновременного оценивания векторов состояния и входных воздействий [3].

2. Квадратно-корневая модификация алгоритма Гиллейнса – Де-Мора

Основная идея квадратно-корневых модификаций алгоритмов фильтрации калмановского типа заключается в представлении положительно определенных матриц, в частности, ковариационной матрицы ошибок оценивания, в виде $P_k = S_k S_k^T$, где S_k — “квадратный корень” матрицы P_k, являющийся нижней треугольной матрицей. Такое представление может быть получено, например, с помощью разложения Холецкого [4]. На каждом этапе квадратно-корневого алгоритма обновление основных величин фильтра выполняется при помощи ортогональных преобразований, применяемых к матричным массивам, содержащим все нужные для расчетов величины, а результаты вычислений также получаются в матричных массивах [5].

В работе [7] сформулирована квадратно-корневая модификация алгоритма Гиллейнса–Де-Мора для систем с неизвестными входными воздействиями. Приведем без доказательства данный алгоритм.

Алгоритм 1. Квадратно-корневой ковариационный алгоритм одновременного оценивания векторов состояния и входных воздействий

Вход: $\bar{c}_0$, Π_0

$\hat{c}_0 = \bar{c}_0$, $S_{P_0} = \mathrm{chol}(\Pi_0)$, $S_{Q_0} = \mathrm{chol}(Q_0)$ // Инициализация

for $k = 1, 2, \ldots, K$ **do**

// Прогноз оценки вектора состояния

$\hat{c}_{k|k-1} = F_{k-1}\hat{c}_{k-1}$

$\begin{bmatrix} S^T_{P_{k|k-1}} \\ 0 \end{bmatrix} = \mathcal{Q}_1 \begin{bmatrix} S^T_{P_{k-1}} F^T_{k-1} \\ S^T_{Q_{k-1}} \end{bmatrix}$

// Оценка вектора входных воздействий

$S_{R_k} = \mathrm{chol}(R_k)$

$\begin{bmatrix} S^T_{\tilde{R}_k} & \bar{K}^T_k \\ 0 & S^T_{P^*_k} \end{bmatrix} = \mathcal{Q}_2 \begin{bmatrix} S^T_{R_k} & 0 \\ S^T_{P_{k|k-1}} H^T_k & S^T_{P_{k|k-1}} \end{bmatrix}$

$\begin{bmatrix} S^T_{D_{k-1}} \end{bmatrix} = \mathcal{Q}_3 \begin{bmatrix} S^{-1}_{\tilde{R}_k} H_k B_{k-1} \end{bmatrix}$

$\tilde{R}^{-1}_k = S^{-T}_{\tilde{R}_k} S^{-1}_{\tilde{R}_k}$

$M_k = S^{-T}_{D_{k-1}} S^{-1}_{D_{k-1}} B^T_{k-1} H^T_k \tilde{R}^{-1}_k$

$\hat{u}_{k-1} = M_k(z_k - H_k\hat{c}_{k|k-1})$

// Коррекция оценки вектора состояния

$K_k = \bar{K}_k S^{-1}_{\tilde{R}_k}$

$\hat{c}^*_k = \hat{c}_{k|k-1} + B_{k-1}\hat{u}_{k-1}$

$\hat{c}_k = \hat{c}^*_k + K_k(z_k - H_k\hat{c}^*_k)$

$\begin{bmatrix} S^T_{P_k} \\ 0 \end{bmatrix} = \mathcal{Q}_4 \begin{bmatrix} S^T_{P^*_k} \\ S^{-1}_{D_{k-1}} B^T_k (I - K_k H_k)^T \end{bmatrix}$

end for

Выход: $\hat{c}_k, S_{P_k}, \hat{u}_{k-1}, S_{D_{k-1}},\ k = 1, 2, \ldots, K$

3. Пример

Пусть требуется идентифицировать граничные условия на левом и правом концах отрезка следующей модели:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + 3\frac{\partial c}{\partial x} = 0.8\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - 4c, \tag{10}$$

$$c(x,0) = 0. \tag{11}$$

$$\begin{cases} c(0,t) = \begin{cases} 2t,\ t \in (0;0.5], \\ \ \ 1,\ t \in (0.5;1]. \end{cases} \\ c(1,t) = t. \end{cases} \tag{12}$$

$$x \in [0;1], t \in [0;1]$$

Процесс идентификации граничных условий будем моделировать в системе MATLAB. Зададим в пространственно-временной области $[0;1] \times [0;1]$ конечно-разностную сетку с 9 узлами по оси Ox и 201 узлом по оси Ot (то есть $N = 8$ и $K = 200$), тогда $\Delta x = 0.125$, $\Delta t = 0.005$, а вектор состояния будет состоять из 7 внутренних узлов пространственной сетки. Матрицу измерений зададим в виде $H = I_7$.

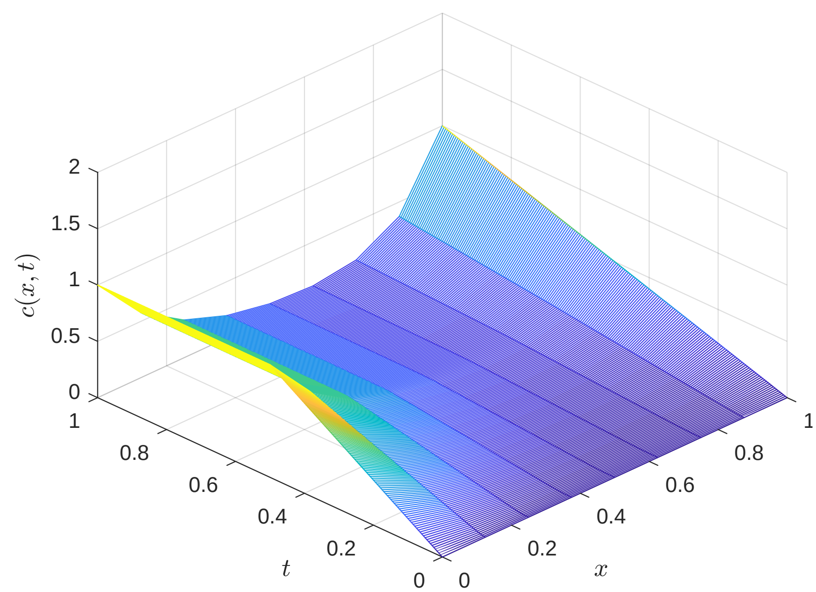

Рис. 1. График решения

На рис. 1 приведен график решения прямой задачи, а на рис. 2 — график смоделированных зашумленных измерений с матрицей ковариации шума в измерителе $R = 0.04^2 I_7$. На рис. 3 и 4 приведены графики оценок левого и правого граничных условий соотвественно.

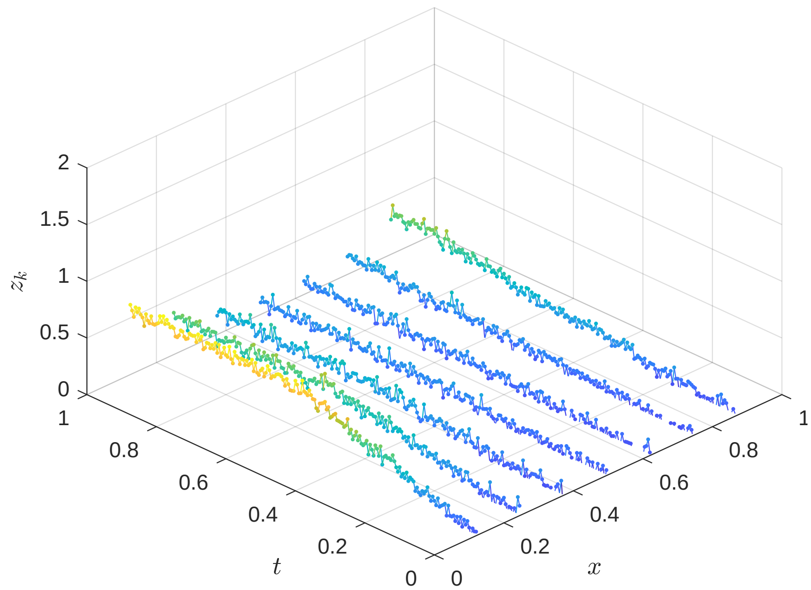

Рис. 2. График зашумленных измерений

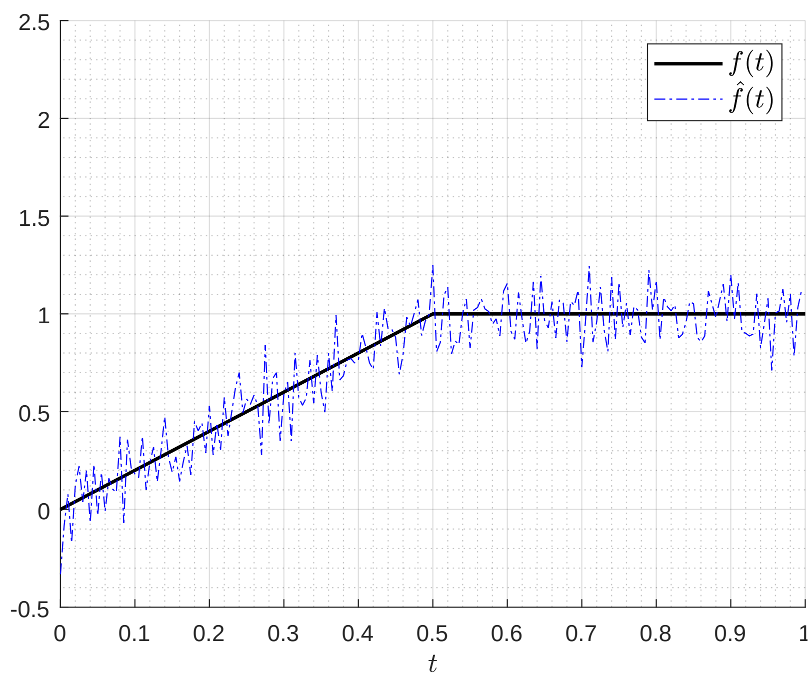

Рис. 3. График функции $f(t)$ и ее оценки

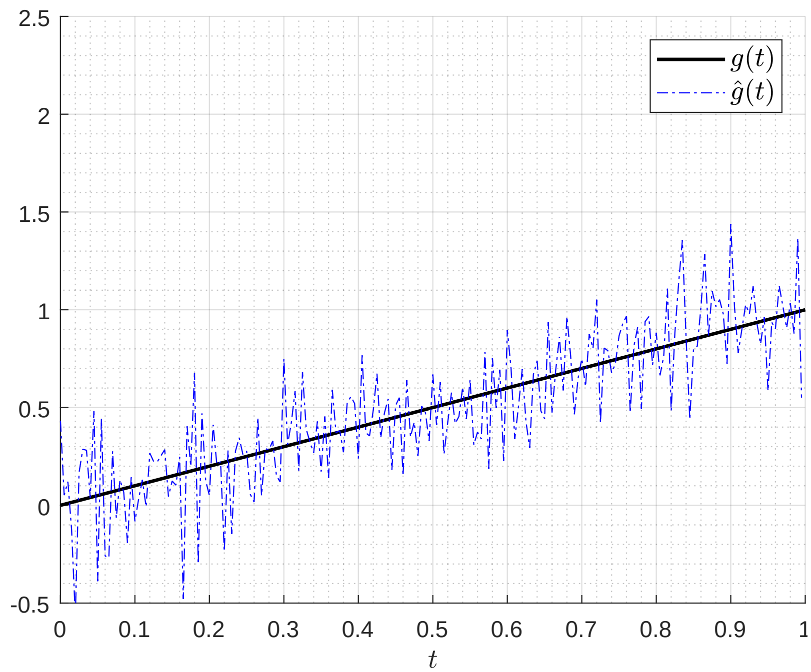

Рис. 4. График функции $g(t)$ и ее оценки

Заключение

В работе рассмотрена задача идентификации граничных условий одномерного уравнения конвекции-реакции-диффузии с граничными условиями первого рода по данным зашумленных измерений. Для решения задачи предлагается использовать квадратно-корневую модификацию рекуррентного алгоритма Гиллейнса – Де-Мора для одновременного оценивания векторов состояния и неизвестных входных воздействий дискретной линейной стохастической системы в пространстве состояний. Результаты моделирования показывают работоспособность предложенного подхода.

Список литературы

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

2. Пилипенко Н.В. *Применение фильтра Калмана в нестационарной теплометрии. Учебное пособие.* СПб.: Университет ИТМО, 2017. 36 с.

3. Gillijns S., Moor B.D. Unbiased minimum-variance input and state estimation for linear discrete-time systems // *Automatica.* 2007. V. 43, p. 111–116.

4. Grewal M.S., Andrews A.P. *Kalman Filtering: Theory and Practice Using Matlab*. 4nd Edition. New York: John Wiley & Sons, Inc., 2015.

5. Цыганова Ю.В., Куликова М.В. О современных ортогонализованных алгоритмах оптимальной дискретной фильтрации // *Вестник ЮУрГУ. Серия: Математическое моделирование и программирование*. 2018. Т. 11, №4, с. 5–30.

6. 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: Издательство Самарского университета, 2023. С. 050322.

7. Кувшинова А.Н., Галушкина Д.В. О квадратно-корневой модификации алгоритма Гиллейнса – Де-Мора // *Ученые записки УлГУ. Серия: Математика и информационные технологии*. 2022. №1, с. 17–22.

On the square-root modification of the Gillijns – De Moor algorithm

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

[*]kuvanulspu@yandex.ru

[1]Ulyanovsk State University, Russia

[2]Ul'yanovsk State Pedagogical University, Russia

The article considers a method for numerical identification of boundary conditions of the mathematical model of convection-diffusion-reaction based on the data of noisy measurements of the values of the desired function. To solve this problem, a transition is made from the initial continuous model with a partial differential equation to a discrete linear stochastic system in the state space, in which the functions included in the boundary conditions are represented as an unknown input vector. A square-root modification of the recurrent Gillijns – De Moor algorithm for simultaneous estimation of state and input vectors is applied to the resulting system. The results of a numerical experiment confirming the practical applicability of the proposed approach are presented.

Keywords: *convection-diffusion-reaction model, discrete linear stochastic system, Gillijns – De Moor algorithm, square-root algorithm.*