УДК 517.956.4

Понижение размерности обратной задачи диффузии с помощью численных методов оптимизации*

Сыромясов А.О.[1], Галкин Д.В.[1], Шуршина А.С.[2]

Национальный исследовательский Мордовский государственный университет[1],
Башкиркский государственный университет[2]

Аннотация: Рассматривается задача определения переменного коэффициента диффузии по результатам измерений средней концентрации примеси в пленке. Решение задачи затруднено как большим числом параметров, от которых зависит искомый коэффициент, так и сложным характером измеренных средних от этих параметров. Предложена гипотеза, позволяющая найти часть неизвестных величин независимо от остальных. Приведены результаты соответствующего численного эксперимента.

Ключевые слова: обратная задача диффузии, метод наименьших квадратов, численная оптимизация.

1. Постановка обратной задачи диффузии

Пусть в некотором объеме V распределено инородное вещество. Его концентрация c в каждой точке объема может изменяться вследствие диффузии; в частности, вещество может покидать V через его границу. Обратная задача диффузии состоит в том, чтобы найти коэффициент диффузии по известным значениям средней концентрации $\langle c\rangle(t)$ в объеме в некоторые моменты t_k, $k = 0, \dots, K-1$. Время $t_0 = 0$ соответствует началу процесса диффузии.

В [1] описана модель диффузии лекарственного вещества (ЛВ) из органической пленки (выступающей в роли V), основанная на следующих предположениях:

- Пленка является бесконечно протяженной в двух взаимно перпендикулярных направлениях из трех. В третьем направлении она имеет толщину $2l$.
- На границах пленки поддерживается нулевая концентрация вещества.
- Начальная концентрация лекарственного вещества одинакова во всех точках пленки: $c_0 = 1$.

Перечисленные гипотезы достаточно стандартны. Отличительной чертой модели служат два дополнительных утверждения:

- Вещество может находиться в свободном или в связанном состояниях: $c = b + f$. При этом связанное ЛВ может переходить в свободное состояние. Динамика этого перехода описывается обыкновенным дифференциальным уравнением первого порядка, решением которого служит функция
$$b(t) = b_\infty + (b_0 - b_\infty)e^{-\beta t}. \tag{1}$$
Здесь b_0, b_∞ – начальная и предельная концентрации связанного ЛВ. В диффузии участвует только свободное вещество, процесс диффузии описывается уравнением в частных производных параболического типа.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, грант мол_а 18-31-00119.

- Коэффициент диффузии зависит от времени по закону

$$D(t) = \frac{D_\infty + (D_0 - D_\infty)e^{-t/t_0}}{1 + \alpha(b(t) - b_0)}. \tag{2}$$

  Это выражение учитывает зависимость свойств пленки от концентрации связанного вещества, а также постепенное набухание пленки в воде с течением времени.

При указанных предположениях средняя концентрация лекарственного вещества изменяется с течением времени по следующему закону:

$$\langle c\rangle(t) = \frac{1}{2}\sum_{n=0}^{\infty} u_n T_n(t) + b_\infty + (b_0 - b_\infty)e^{-\beta t}, \tag{3}$$

причем

$$\begin{aligned} &u_n = \frac{2(-1)^n}{\lambda_n l},\ \lambda_n = \frac{1}{l}\Big(\frac{\pi}{2} + \pi n\Big),\\ &T_n(t) = u_n e^{-\lambda_n^2 I_D(t)}\Big[f_0 - \int_0^t \frac{db(s)}{ds} e^{\lambda_n^2 I_D(s)} ds\Big],\\ &I_D(t) = \int_0^t D(p)dp. \end{aligned}$$

Здесь функции $b(t)$ и $D(t)$ имеют вид (1) и (2), соответственно. Для параметров b_0 и f_0 выполнено соотношение $b_0 + f_0 = c_0$.

Т. о., при решении обратной задачи необходимо найти неизвестные постоянные b_0, b_∞, α, β, t_0, D_0, D_∞.

Как правило, известные c_k сходятся к некоторому пределу при увеличении номера k. Поскольку все $T_n(t)$ весьма быстро сходятся к нулю при $t \to \infty$, то из (1) следует, что $b_\infty \approx c_{K-1}$. Остальные неизвестные параметры должны подбираться так, чтобы выполнялось условие

$$Q^2 = \sum_{k=0}^{K-1} (\langle c\rangle(t_k) - c_k)^2 \to \min. \tag{4}$$

В приведенной формуле $\langle c\rangle(t_k)$ вычисляются по формуле (3).

В связи с громоздкостью выражения (3) указанная задача может быть решена только приближенно.

2. Понижение размерности задачи

Сложный характер зависимости Q^2 от искомых параметров и большое количество величин, подлежащих определению, затрудняет применение известных численных методов оптимизации [2].

Для упрощения задачи предлагается понизить ее размерность. При некоторых дополнительных предположениях зависимость средней концентрации от времени примет иной вид и будет включать не шесть параметров, как ранее, а некоторый более узкий их набор, который будет проще отыскать. Значения найденных величин затем можно будет подставить в выражения (3), (4) и найти оставшиеся параметры.

Пусть значения t достаточно малы. Тогда функция $I_D(t)$, наличие которой создает основные вычислительные трудности, упрощается:

$$I_D(t) \approx D(0)t,$$

причем из (1) и (2) следует, что

$$D(0) = \frac{D_0}{1 + \alpha(b_0 - \beta_\infty)}.$$

Поэтому выражение для средней концентрации при малых t принимает вид:

$$\langle c \rangle(t) \approx b_\infty + (b_0 - b_\infty)e^{-\beta t} + \frac{f_0}{2}\sum_{n=0}^{\infty} u_n^2 e^{-\lambda_n^2 D(0)t} + \frac{\beta(b_0 - b_\infty)}{2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{u_n^2}{D(0)\lambda_n^2 - \beta}\Big[e^{-\beta t} - e^{-\lambda_n^2 D(0)t}\Big]. \tag{5}$$

В силу быстрого роста множителей λ_n^2 и убывания соответствующих экспонент бесконечные пределы суммирования в (5) можно заменить на сравнительно небольшие конечные пределы: $n \leq 100$.

Значения функции (5), вычисленные при заданных t_k, должны быть подставлены в (4), после чего можно будет отыскать b_0, β, $D(0)$.

3. Описание и результаты численного эксперимента

Для проведения тестового расчета были выбраны значения $b_0 = 0.8$, $b_\infty = 0.05$, $\alpha = 0.5$, $\beta = 1.0$, $D_0 = 5.0$, $D_\infty = 12.0$, $t_0 = 48$. Согласно формуле (3), по ним были сгенерированы $K = 15$ значений c_k в моменты

$$t_k = 0;\ 0.17;\ 0.33;\ 0.50;\ 1.00;\ 1.50;\ 2.00;\ 3.00;\ 4.00;\ 5.00;\ 24.00;\ 72.00;\ 144.00;\ 168.00;\ 192.00.$$

Эти моменты времени (в часах) соответствуют моментам проведения измерений средней концентрации в экспериментах по выделению лекарственного вещества из хитозановой пленки.

При решении упрощенной задачи (4), (5) был проведен сравнительный анализ нескольких численных методов: Розенброка, сопряженных градиентов, Марквардта [2], а также реализованных в открытых библиотеках методов Нелдера-Мида [3], Левенберга-Марквардта [4] и глобальной оптимизации [5].

Предварительно из сгенерированных данных было найдено значение $b_\infty = 0.05$. На остальные параметры в ходе реализации перечисленных методов накладывались следующие ограничения:

$$c_0 = 1,\ b_0 \in [0;1],\ \alpha \in [0;10],\ \beta \in [0;25],\ D_0 \in [0;9],\ D_\infty \in [0;17],\ t_0 \in [0;72].$$

В результате было получено, что первые четыре из перечисленных выше методов дают близкие между собой значения $Q^2 \approx 0.006$. Минимум величины $Q^2 \approx 0.002$ был достигнут при использовании алгоритма Левенберга-Марквардта из библиотеки Ceres Solver. Наконец, алгоритм глобальной оптимизации занимает промежуточное положение с $Q^2 \approx 0.003$.

Метод Левенберга-Марквардта дал следующие значения искомых параметров: $b_0 \approx 0.802$, $\beta \approx 0.942$. Т. о., применение указанного метода обеспечивает достаточно точное совпадение приближенно найденных параметров модели с реальными.

Литература

1. Сыромясов А.О., Шуршина А.С., Галкин Д.В. Модель диффузии лекарственного вещества с учетом его связывания в органической пленке // Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ имени Е.В. Воскресенского: VIII Международная научная молодежная школа-семинар (Саранск, 16–20 июля 2018 г.). Саранск, 2018. С. 150–155.

2. Афонин В.В., Никулин В.В. Методы моделирования и оптимизации м примерами на языке C/C++ и MATLAB. Ч. II. Методы безусловной оптимизации. Саранск, Издатель Афанасьев В.С., 2017. 232 с.

3. GNU Scientific Library [Электронный ресурс]. Режим доступа: http://www.gnu.org/software/gsl/doc/html/multimin.html.

4. Ceres Solver [Электронный ресурс]. Режим доступа: http://ceres-solver.org.

5. Global function search [Электронный ресурс]. Режим доступа: http://dlib.net/optimization.html#global_function_search.

MSC2010 35K05 80A20 80A23 90C30 65K05

Dimensionality reduction in inverse diffusion problem by means of numerical optimization methods

A.O. Syromyasov[1], D.V. Galkin[1], A.S. Shurshina[2]

National Research Ogarev Mordovia State University[1], Bashkir State University[2]

Abstract: Article discusses the problem of determination of variable diffusion coefficient when the average concentration of admixture in organic film is measured and known in some moments of time. The problem is hard to solve for two reasons. First, the diffusion coefficient depends on large amount of parameters. Second, the dependence of average concentration on these parameters is complicated. The hypothesis is proposed that allows to find some of the parameters independently from others. Results of corresponding numerical experiment are stated.

Keywords: inverse diffusion problem, least squares method, numerical optimization.

References

1. Syromyasov A.O., Shurshina A.S., Galkin D.V. Model of diffusion of medicine that is bonded inside an organic film // VIII International Scientific Youth School-Seminar "Mathematical Modeling, Numerical Methods and Software complexes" named after E.V. Voskresensky (Saransk, July 16–20, 2018). Saransk, 2018. P. 150–155 (in Russian).

2. Afonin V.V., Nikulin V.V. Metody modelirovaniya i optimizacii m primerami na yazyke C/C++ i MATLAB. CH. II. Metody bezuslovnoj optimizacii. Saransk, Afanasiev V.S. Publishers, 2017. 232 p.

3. GNU Scientific Library. http://www.gnu.org/software/gsl/doc/html/multimin.html.

4. Ceres Solver. http://ceres-solver.org.

5. Global function search. http://dlib.net/optimization.html#global_function_search.