

Визначення за дискретними даними функції концентрації домішкових частинок у граничній умові задачі масоперенесення

<https://doi.org/10.31713/MCIT.2025.090>

Богдан Гера

Відділ числових методів математичної фізики
Інститут прикладних проблем механіки і математики
ім. Я.С. Підстригача НАНУ
Львів, Україна
gera-zen@ukr.net

Анастасія Чучвара

Відділ числових методів математичної фізики
Інститут прикладних проблем механіки і математики
ім. Я.С. Підстригача НАНУ
Львів, Україна
davydoka@gmail.com

Ольга Чернуха

Відділ числових методів математичної фізики
Інститут прикладних проблем механіки і математики
ім. Я.С. Підстригача НАНУ
Кафедра обчислювальної математики і
програмування
Національний університет “Львівська політехніка”,
Львів, Україна
zaliznuchna6@gmail.com

Юрій Білушак

Відділ числових методів математичної фізики
Інститут прикладних проблем механіки і математики
ім. Я.С. Підстригача НАНУ
Кафедра обчислювальної математики і
програмування
Національний університет “Львівська політехніка”,
Львів, Україна
byixx13@gmail.com

Анотація—Виходячи з сукупності числових значень концентрації домішкової речовини на одній з границь пористого шару, що виникає в процесі перенесення домішок у пористому середовищі, проведено відновлення, з використанням параметричного сімейства функцій, граничної умови для задачі масоперенесення в шарі при наявності сорбції. Невідомі їх параметри знаходимо методами математичного програмування. Розроблено програмний модуль, що дає можливість проводити обчислювальні експерименти. Проведено числові розрахунки відновленої функції для різних сукупностей числових даних та із запропонованими варіантами параметричних функцій, що дає можливість використовувати найбільш прийнятні з них у кожному з випадків вхідних даних.

Ключові слова—визначення граничної умови, масоперенесення, параметричне сімейство функцій, нелінійна оптимізація.

I. ВСТУП

Визначення функції концентрації домішкових частинок, що переносяться у пористому тілі, з рівняння дифузії-адвекції-сорбції за неповних граничних чи початкових умов або параметрів рівнянь та при додатково відомих дискретних значеннях шуканої функції в області тіла чи на його границі належить до погано обумовлених задач. Проте з цим доводиться мати справу при розв'язанні прикладних задач. Наприклад, такі задачі характерні для гідрогеології (відновлення потоків і концентрацій забрудників), теплофізики (визначення теплового потоку

без прямого вимірювання), хімічної технології (ідентифікація параметрів сорбції чи швидкості реакцій) та біомедицини (оцінка перенесення речовин у тканинах за непрямыми даними) [1, 4, 7]. У всіх цих випадках прямий експеримент не дозволяє безпосередньо задати граничну умову на деякій поверхні, водночас відомі лише дискретні вимірювання поля (концентрації, температури, тиску тощо) у внутрішніх точках або на границях. Це приводить до задач з неповними або неточними даними, які вимагають спеціальних методів регуляризації для забезпечення існування та єдиності розв'язку.

При цьому особливий інтерес становлять моделі масоперенесення у пористих середовищах, де одночасно відбуваються дифузія, адвекція та сорбція. Такі процеси характерні для руху домішок у ґрунтових водах, фільтраційних шарах, пористих будівельних матеріалах, а також у багатьох технологічних установках.

У даній роботі досліджено відновлення невідомої граничної умови для концентрації домішкових частинок на одній з поверхонь пористого шару за відомих ній сукупності дискретних значень концентрації.

II. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧІ

Розглянуто шар пористої речовини, що займає область $0 \leq x \leq x_0$. На поверхні $x = 0$, починаючи з деякого моменту часу, діє постійне джерело маси домішкових частинок, що проникають всередину шару, де відбувається їх дифузія, адвекція з постій-

ною швидкістю та сорбція пов'язана з пористістю речовини. У такому випадку рівняння для функції концентрації домішкових частинок $c(x, t)$ в середині шару можемо записати у вигляді [3]

$$\frac{\partial c(x, t)}{\partial t} = d \frac{\partial^2 c(x, t)}{\partial x^2} - v \frac{\partial c(x, t)}{\partial x} - \kappa c(x, t),$$

де x – просторова координата ($0 < x < x_0$), t – час ($t > 0$), d – коефіцієнт дифузії домішки, v – швидкість адвективного перенесення, κ – коефіцієнт інтенсивної сорбції.

Прийнято, що в початковий момент часу відсутня домішкова речовина в тілі, тобто

$$c(x, 0) = 0,$$

а на верхній границі тіла діє стале джерело маси, домішкової речовини

$$c(0, t) = c_0.$$

Для коректної постановки задачі необхідна ще умова на границі $x = x_0$, де концентрація змінюється природним чином, без спеціального зовнішнього впливу на процеси всередині шару. Нехай відомо (або можна виміряти) значення функції концентрації $c(t, x)$ на нижній границі $x = x_0$ в певні моменти часу (Таблиця 1).

ТАБЛИЦЯ 1. ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНІ ЗНАЧЕННЯ ШУКАНОЇ ФУНКЦІЇ НА ГРАНИЦІ $x = x_0$

t	t_1	t_2	t_3	t_4	t_5	...	t_n
$F(t)$	0	0	0	$F(t_4)$	$F(t_5)$	...	$F(t_n)$

Тобто, маємо умову $F(t) = c(t, x_0)$.

Таким чином отримано задачу з неповними даними, а отже потрібно визначитися з критерієм та зробити припущення для обґрунтування вибору з множини допустимих функцій, що задовольняють відомі умови, найбільш прийнятної для нашого випадку.

Маємо типову задачу з неповними даними. Потрібно визначитися з критерієм вибору з множини допустимих неперервних функцій, що задовольняють відомі умови, найбільш прийнятної для функції концентрації домішок на границі.

III. ВИЗНАЧЕННЯ ГРАНИЧНОЇ УМОВИ НА НИЖНІЙ ПОВЕРХНІ ШАРУ

Для зручності виконано перехід до безрозмірних змінних, що стискають часову та розтягують просторову осі [4]: $\tau = \kappa t$, $\xi = (\kappa/d)^{1/2} x$, $C(\xi, \tau) = c(x, t)/c_*$, де c_* задана величина з розмірністю концентрації, а також прийнято $\kappa > 0$. Такий підхід не залежить від геометрії тіла чи характерних масштабів його мікронеоднорідностей.

Для відновлення зміни у часі функції концентрації на поверхні $\xi = \xi_0$ використано параметричне сімейство функцій $\Psi(\tau, \alpha_i) \equiv \Psi(\tau, \alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_m)$, де α_i ($i = 1; m$) – невідомі параметри, котрі потрібно встановити, щоб оптимально наблизитися до дискретних даних і не було суперечностей з іншими характеристиками задачі.

У багатьох застосуваннях шукану граничну функцію подають у вигляді лінійної комбінації відомих функцій

$$\Psi(\tau, \alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_m) = \alpha_1 \psi_1(\tau) + \alpha_2 \psi_2(\tau) + \dots + \alpha_m \psi_m(\tau),$$

де α_i – шукані коефіцієнти, а $\psi_i(\tau)$ – відомі функції.

Тоді визначальним може виявитися вибір цих базових функцій. Часто їх приймають у вигляді поліномів. Однак для моделі дифузії-адвекції-сорбції це не завжди коректно, оскільки їх лінійна комбінація не має стосунку до функцій концентрації домішкових частинок.

Оскільки на одній з поверхонь шару концентрація встановлюється постійною і звідти частинки поширюються в шарі, то потрібно орієнтуватися на відновлення функції, що спадає при віддаленні від цієї поверхні, але монотонно зростає з часом.

Тому розглянуто більш загальний випадок, коли функції $\Psi(\tau, \alpha_i)$ від α_i є нелінійними і мають потрібні властивості.

Як приклад наведемо наступні функції, що більш прийнятні для наближення концентрації, оскільки аналітичні розв'язки модельних задач дифузії-адвекції-сорбції мають подібні складові

$$\Psi_1(\tau, \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3) = \alpha_1 \cdot \operatorname{erfc}\left(\frac{\alpha_2}{\sqrt{\tau}} - \alpha_3 \sqrt{\tau}\right),$$

$$\Psi_2(\tau, \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3) = \alpha_1 \cdot \operatorname{erfc}\left(\frac{\alpha_2}{\sqrt{\tau}} + \alpha_3 \sqrt{\tau}\right),$$

$$\begin{aligned} \Psi_3(\tau, \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4) &= \alpha_1 \cdot \operatorname{erfc}\left(\frac{\alpha_3}{\sqrt{\tau}} - \alpha_4 \sqrt{\tau}\right) + \\ &+ \alpha_2 \cdot \operatorname{erfc}\left(\frac{\alpha_3}{\sqrt{\tau}} + \alpha_4 \sqrt{\tau}\right), \end{aligned}$$

а також з метою порівняльного аналізу розглянуто параметричні функції, що містять поліноміальну, тригонометричну та обернену тригонометричну функції наступного вигляду

$$\Psi_4(\tau, \alpha_1, \dots) = \alpha_1 + \alpha_2 \cdot t + \alpha_3 \cdot t^2 + \alpha_4 \cdot t^3 + \alpha_5 \cdot t^4 + \dots$$

$$\Psi_5(\tau, \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3) = \alpha_1 + \alpha_2 \cdot \arctg(\alpha_3 t + \alpha_4),$$

$$\Psi_6(\tau, \alpha_1, \dots) = \sum_{j=1}^m \alpha_j \cdot \sin\left(\frac{\pi j}{2T}\right).$$

Тоді шукані параметри α_i у розглянутих функціях визначатимемо таким чином, щоб наблизитися до заданих значень $C(\xi_0, \tau_j)$ в сенсі мінімуму середньоквадратичного відхилення

$$S(\alpha_1, \dots, \alpha_m) = \sum_{j=1}^n \left(C(\xi_0, \tau_j) - \Psi(\tau_j, \alpha_1, \dots, \alpha_m) \right)^2, \quad (1)$$

за умов $\alpha_i > 0$.

IV. МЕТОДИ ПОШУКУ ОПТИМАЛЬНИХ ПАРАМЕТРІВ

Для оптимізації розв'язку $\alpha = (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_m)$ нелінійної задачі найменших квадратів (1) застосовано наступні методи:

Метод градієнтного спуску [5], алгоритм якого передбачає на кожному кроці оновлення параметрів

$$\alpha_i^{(k+1)} = \alpha_i^{(k)} - l \frac{\partial S(\alpha_i)}{\partial \alpha_i},$$

де $\alpha_i^{(k)}$ – значення параметра на k -й ітерації, l – швидкість навчання, тобто величина кроку на кожній ітерації, $\partial S(\alpha_i)/\partial \alpha_i$ – значення градієнту по кожному параметру.

Алгоритм повторюється до досягнення однієї з умов зупинки, наприклад, досягнута максимальна кількість ітерацій, норма градієнта стала меншою за наперед задане значення, функція помилки практично не змінюється, тощо.

Метод Левенберга-Марквардта (Levenberg-Marquardt, LM) [8] – це поєднання методу градієнтного спуску та методу Ньютона для знаходження мінімуму функції, що базується на найменших квадратах.

Для цього алгоритму на кожному кроці оновлюємо параметри за формулою

$$\alpha_i^{(k+1)} = \alpha_i^{(k)} + \Delta \alpha.$$

Тут $\Delta \alpha$ – величина оновлення параметрів, що визначається як розв’язок рівняння

$$(J^T J + \lambda I) \Delta \alpha = J^T r,$$

де J – матриця Якобі (похідні залишків по параметрах), r – вектор лишків, елементи якого визначаються як $r_i = C(\xi_0, \tau_i) - \Psi(\tau_i, \alpha_i)$, λ – коефіцієнт демпфування (регуляція перемикавання алгоритму між методом градієнтного спуску та методом Ньютона), I – одинична матриця.

Метод довірчої області TRF (Trust Region Reflective) [9] передбачає, що на кожній ітерації обчислюється лінійна апроксимація функції залишків у точці

$$r(\alpha + \Delta \alpha) \approx r(\alpha) + J \Delta \alpha,$$

та розв’язується задача найменших квадратів у довірчій області $\min_{\Delta \alpha} \|r + J \Delta \alpha\|^2$ при $\|\Delta \alpha\| \leq \Delta$ (Δ – радіус довірчої області), враховуючи обмеження $\alpha_{\min} \leq \alpha + \Delta \alpha \leq \alpha_{\max}$. Обчислюємо, наскільки добре цей крок покращує реальну функцію. Якщо покращення суттєве, то приймаємо цей крок та збільшуємо довірчу область, у протилежному випадку крок відкидаємо та зменшуємо довірчу область.

Метод Dogbox (Dogleg) [6], ключовою особливістю якого є побудова кроку за алгоритмом Пауелла, що є опуклою комбінацією кроку Коші (крок вздовж напрямку найшвидшого спуску) та кроку Гауса-Ньютона. Метод Dogbox ефективний, оскільки потребує всього одного розв’язання лінійної системи за ітерацію та часто виявляється більш стійким, ніж класичний підхід Гауса-Ньютона з пошуком уздовж прямої.

Для порівняння також розглянуто *метод прямого пошуку по сітці*. Це простий, але обчислювально витратний підхід, який виконує повний перебір значень параметрів на заздалегідь заданій сітці $\alpha_{\min} \leq \alpha \leq \alpha_{\max}$. Алгоритм оцінює цільову функцію у кожній точці цієї сітки та обирає параметри, що дають найкращий результат.

Методи довірчої області та Dogbox дають змогу враховувати обмеження на шукані параметри, що особливо важливо під час розв’язання задач, у яких отримані розв’язки мають узгоджуватися з фізичними процесами та природними обмеженнями системи.

V. ОБЧИСЛЮВАЛЬНИЙ ЕКСПЕРИМЕНТ І АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ

Для проведення чисельної оптимізації параметрів функції, що задає граничну умову для концентрації домішкової речовини на нижній границі тіла, розроблено програмний модуль, який реалізує описані вище алгоритми та забезпечує порівняння отриманих результатів для різних типів апроксимуючих функцій. Програмну реалізацію здійснено мовою Python; для створення графічного інтерфейсу користувача застосовано бібліотеку PyQt, яка надала можливість розробити інтерактивне середовище для задання параметрів, запуску обчислень та аналізу отриманих результатів.

Для ілюстрації запропонованого підходу приведемо числові експерименти для невеликої кількості вхідних даних C_j , поданих у Таблиці 2.

Як приклад, в якості апроксимуючої функції використано функцію $\Psi_3(\tau, \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4)$ та визначено невідомі параметри, використовуючи дані цієї таблиці.

ТАБЛИЦЯ II. ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНІ ЗНАЧЕННЯ ШУКАНОЇ ФУНКЦІЇ ДЛЯ ЧИСЕЛЬНОГО ДОСЛІДЖЕННЯ

Серія 1		Серія 2	
τ_j	C_j	τ_j	C_j
0	0	0	0
0.07	0.0007	0.05	0.001
0.14	0.0013	0.12	0.003
0.21	0.0175	0.20	0.015
0.28	0.0455	0.33	0.036
0.35	0.062	0.47	0.055
0.42	0.0725	0.58	0.069
0.49	0.0905	0.66	0.082
0.56	0.0965	0.79	0.091
0.63	0.098	0.92	0.095
0.7	0.098	1.0	0.097

В якості початкових значень шуканих параметрів прийнято $\alpha = (1, 1, 1, 1)$. Крім того, для методу прямого пошуку по сітці використано такі значення для сітки $\alpha_{\min} = 0.1$, $\alpha_{\max} = 2$, $\Delta \alpha = 0.1$. Зазначимо, що для даного числового експерименту додаткових обмежень на значення параметрів для методів довірчої області та Dogleg не накладалось. Отримані параметри та відповідні середньоквадратичні похибки для кожного методу, є наступними

Серія 1	Серія 2
LM метод: $\alpha_1 = 0.032264042$ $\alpha_2 = 48.543469981$ $\alpha_3 = 0.840721664$ $\alpha_4 = 1.544771283$ Похибка: 0.000062163	LM метод: $\alpha_1 = -8.593619524$ $\alpha_2 = 9.328616297$ $\alpha_3 = 0.678155741$ $\alpha_4 = 0.011723912$ Похибка: 0.000036942
TRF метод: $\alpha_1 = 48.544331874$ $\alpha_2 = 0.032264418$ $\alpha_3 = 0.840722187$ $\alpha_4 = -1.544777542$	TRF метод: $\alpha_1 = 0.056589635$ $\alpha_2 = -1.797649114$ $\alpha_3 = 0.558786769$ $\alpha_4 = 1.547215129$

Похибка: 0.000062163

Похибка: 0.000034807

Dogbox метод: $\alpha_1 = 0.032273309$ $\alpha_2 = 48.563889855$ $\alpha_3 = 0.840733581$ $\alpha_4 = 1.544922621$

Похибка: 0.000062163

Dogbox метод: $\alpha_1 = 0.049754130$ $\alpha_2 = -57.31032440$ $\alpha_3 = 0.803153472$ $\alpha_4 = 2.194245302$

Похибка: 0.000120164

Метод градієнтного спуску: $\alpha_1 = -0.046294616$ $\alpha_2 = 1.173746504$ $\alpha_3 = 0.630153841$ $\alpha_4 = 0.441725717$

Похибка: 0.000246033

Метод градієнтного спуску: $\alpha_1 = -0.023059898$ $\alpha_2 = 0.954022388$ $\alpha_3 = 0.692908363$ $\alpha_4 = 0.407743884$

Похибка: 0.000038651

Метод пошуку по сітці: $\alpha_1 = 0.100000000$ $\alpha_2 = 0.400000000$ $\alpha_3 = 0.600000000$ $\alpha_4 = 0.600000000$

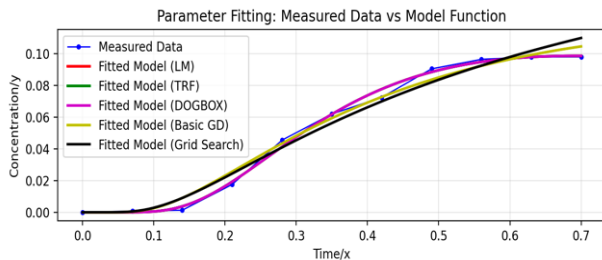
Похибка: 0.000413166

Метод пошуку по сітці: $\alpha_1 = 0.100000000$ $\alpha_2 = 0.100000000$ $\alpha_3 = 0.600000000$ $\alpha_4 = 0.500000000$

Похибка: 0.000113159

На Рис. 1 подано графіки апроксимуючої функції $\Psi_3(\tau, \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4)$ для двох серій, параметри якої визначено зазначеними методами оптимізації.

Серія 1



Серія 2

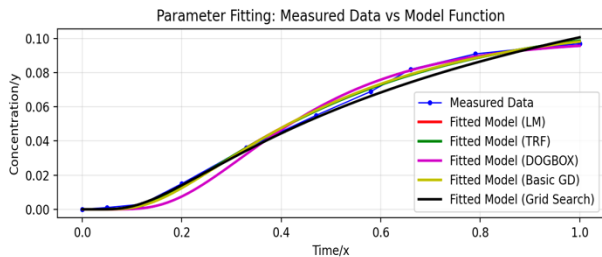


Рисунок 1. Функція $\Psi_3(\tau, \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4)$, що апроксимує експериментальні дані, з параметрами, знайденими різними методами оптимізації

Для першого набору експериментальних даних, найменше значення похибки досягається для методів Левенберга-Марквардта, довірчої області та Dogbox методу, для другого – метод довірчої області. Проте, значення похідної від шуканої функції для першого набору даних $\Psi_3(\tau, \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4)$ за одержаними параметрами для цих трьох методів у точці $\tau = 0.7$ є від'ємними, що суперечить фізичному процесу, який розглядається (концентрація домішкової речовини на нижній границі тіла природньо має бути зростаючою функцією). Відтак одним із додаткових критеріїв вибору оптимальних параметрів для шуканої функції є умова невід'ємних значень її градієнта.

Відповідно до цієї умови, для даного експерименту оптимальним вважаємо набір параметрів,

знайдених методом градієнтного спуску. Водночас, даний критерій для методів довірчої області та Dogbox буде виконуватись, якщо під час виконання алгоритму додатково накласти обмеження на параметри $\alpha_i > 0$.

VI. ВИСНОВКИ

У роботі розглянуто задачу відновлення невідомої граничної умови для концентрації домішкової речовини на нижній поверхні пористого шару за експериментальними даними. Побудовано математичну модель масоперенесення з урахуванням дифузії, адвекції та сорбції, і сформульовано задачу оптимізації параметрів граничної умови з використанням нелінійних параметричних сімейств функцій. Розроблено програмний модуль, який реалізує низку методів чисельної оптимізації – градієнтний спуск, Левенберга-Марквардта, довірчої області, Dogbox та пошук по сітці. Модуль забезпечує проведення обчислювальних експериментів і порівняння результатів для різних типів апроксимуючих функцій. На основі вибірки експериментальних даних, виконано числовий аналіз та отримано оптимальні значення параметрів для кількох методів та проаналізовано вплив вибору алгоритму на точність апроксимації і фізичну узгодженість розв'язку. Показано, що методи довірчої області та Dogbox дозволяють враховувати обмеження на параметри, а додатковий критерій невід'ємності градієнта забезпечує фізичну коректність відновленої граничної умови.

ЛІТЕРАТУРА

- [1] T. Bandai and T. A. Ghezzehei, "Forward and inverse modeling of water flow in unsaturated soils with discontinuous hydraulic conductivities using physics-informed neural networks with domain decomposition," *Hydrol. Earth Syst. Sci.*, vol. 26, pp. 4469–4495, 2022, doi: 10.5194/hess-26-4469-2022.
- [2] Y. Chaplya and O. Chernukha, *Physical-mathematical modelling heterodiffusive mass transfer*. Lviv, Ukraine: SPOLOM, 2003.
- [3] O. Chernukha, P. Pukach, H. Bilushchak, Y. Bilushchak, and M. Vovk, "Advanced statistical approach for the mathematical modeling of transfer processes in a layer based on experimental data at the boundary," *Symmetry*, vol. 16, p. 802, 2024, doi: 10.3390/sym16070802.
- [4] D. Das, E. Coello, R. Schulte, and B. Menze, "Quantification of metabolites in magnetic resonance spectroscopic imaging using machine learning," in *Proceedings of MICCAI 2017*, pp. 462–470, 2017, doi: 10.1007/978-3-319-66179-7_53.
- [5] C. Lemaréchal, "Cauchy and the gradient method," in *Optimization Stories*, M. Grötschel, Ed. Documenta Mathematica Series, vol. 6, EMS Press, pp. 251–254, Jan. 2012, doi: 10.4171/dms/6/27.
- [6] M. L. A. Lourakis and A. A. Argyros, "Is Levenberg–Marquardt the most efficient optimization algorithm for implementing bundle adjustment?," in *Tenth IEEE International Conference on Computer Vision (ICCV'05)*, vol. 2, Beijing, China, 2005, pp. 1526–1531, doi: 10.1109/ICCV.2005.128.
- [7] C. Madie Yonti, R. Mérimé Nonki, D. Dansi, F. Nkili, and F. Togue Kanga, "Effect of adsorption coefficient and sorption intensity on the spatiotemporal variation of contaminant concentration in saturated porous media using the fractional advection–dispersion equation," *Discover Applied Sciences*, vol. 7, pp. 1–13, 2025, doi: 10.1007/s42452-025-06903-8.
- [8] D. Marquardt, "An algorithm for least-squares estimation of nonlinear parameters," *SIAM J. Appl. Math.*, vol. 11, pp. 431–441, 1963.
- [9] J. J. Moré and D. C. Sorensen, "Computing a trust region step," *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, vol. 3, pp. 553–572, 1983.