Министерство науки и высшего образования Российкой Федерации
ФГАОУ ВО "Северо-Восточный федеральный университет имени
М. К. Аммосова"

На правах рукописи

Григорьев Василий Васильевич

Вычислительная идентификация скоростей поверхностных реакций в масштабе пор

Специальность: 1.2.2. Математическое моделирование,
численные методы и комплексы программ

ДИССЕРТАЦИЯ
на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:
д. ф.-м. н., профессор
Вабищевич Петр Николаевич

Якутск – 2022

Содержание

Введение **4**

1 Реагирующие потоки в пористых средах **23**

1.1 Математическая модель 23

1.2 Обезразмеренные формы уравнений 27

1.3 Вариационная формулировка 30

1.4 Геометрия и вычислительная сетка 32

1.5 Численный анализ модели 36

1.6 Выводы 48

2 Детерминированные и стохастические методы идентификации параметров адсорбции и десорбции **49**

2.1 Детерминированный подход 50

2.2 Влияние шума в экспериментальных данных 53

2.3 Стохастическая идентификация параметров 56

2.4 Многоступенчатая идентификация параметров 60

2.5 Метод Монте-Карло 62

2.6 Выводы 64

3 Байесовский подход в идентификации параметров адсорбции и десорбции **65**

3.1 Байесовский подход 65

3.2 Метод Монте-Карло на цепях Маркова 67

3.3 Алгоритм Метрополиса-Гастингса 68

3.4 Алгоритм адаптивного Метрополиса 69

3.5 Результаты 70

3.6 Выводы 77

4 Эвристический подход для идентификации параметров 78

4.1 Алгоритмы пчелиной колонии 78

4.2 Идентификация параметров 104

4.3 Детерминированный подход 106

4.4 Эвристический подход 108

4.5 Случай доминирующей диффузии 114

4.6 Выводы 117

Заключение 119

Литература 120

Приложение 142

Введение

Пористая среда — это материал, состоящий из пор и твердого скелета. Пористые среды широко распространены во многих отраслях техники и науки, таких как: электроды в топливных элементах и батареях [1, 2], резервуары углеводородных ресурсов [3], системы секвестрации $CO2$ [4], пенометалл в теплообменниках [5], теплоизоляционные материалы [6], реакторы с уплотненным слоем [7], фильтраторы воздуха через волокнистую мембрану [8], биологические системы [9] и так далее. Эксплуатационные характеристики пористых сред зависят не только от химического состава материалов, но и от процессов переноса (течение жидкости, тепло- и массоперенос, химические реакции и т.д.), протекающих внутри пористых сред. По сравнению с простой геометрией, пористые структуры характеризуются обилием интерфейса между различными составляющими, что приводит к сложным процессам переноса. Понимание явлений и механизмов переноса внутри пористых сред имеет решающее значение для оптимизации структур материалов, контроля связанных процессов и улучшения характеристик [10–12].

В реальных инженерных задачах изучаемые случаи пористых сред обычно состоят из сложных микронеоднородностей, что приводит к высоким вычислительным затратам на детальное моделирование микроструктур [13]. Примеров можно привести много: нефтяной пласт [14], мембрана фильтров очистки [15], композитные материалы [16], сердечно-сосудистая система [17] и так далее. Такие среды имеют характерную многомасштабную структуру. В промышленности важно учитывать все геометрические уровни рассматриваемого материала, проводить расчет свойств отдельного материала или поведения системы на одном уровне с использованием информации с разных уровней. Естественно, исследуемые процессы на каждом уровне могут проходить в своем пространственном или временном масштабе, из-за чего следует то, что для каждого

уровня будут требоваться свои отдельные подходы. Многомасштабное моделирование особенно важно в инженерии материалов, поскольку оно позволяет прогнозировать свойства материалов или поведение системы на основе знания взаимосвязей между процессом, структурой и свойствами [18–20]. В нашей работе будет рассматриваться пористая среда в маштабе пор, когда учитывается их геометрия.

Потоки в пористых средах сильно зависят от вездесущей структурной неоднородности пористых включений. В зависимости от масштаба, могут применяться разные математические модели, описывающие гидродинамические процессы [21]. Потоки через пористую среду имеют множество инженерных и геофизических приложений, например: в области химической технологии для процессов фильтрации и очистки [22, 23], в области сельскохозяйственного машиностроения для изучения ресурсов подземных вод [24], в нефтяной промышленности для изучения движения природного газа, нефти и воды по нефтяным каналам и резервуарам [25].

Исторически сложилось так, что большая часть теоретических и экспериментальных исследований переноса в пористых средах в целом и реагирующего потока, в частности, проводилась в макроскопическом приближении Дарси [11, 26]. Моделирование в масштабе пор играет все более важную роль в понимании процессов переноса в пористой среде. Оно может обеспечить детальное описание связанных переменных (скорость, давление, температура, концентрация и т. д.), которые трудно измерить экспериментальными методами [27]. На основе этих распределенных величин в масштабе пор, можно рассчитать макроскопические транспортные свойства пористых сред (проницаемость, эффективная диффузионная способность, эффективная теплопроводность и т. д.), которые представляют фундаментальный интерес для дизайна пористых сред. Эти транспортные свойства также могут быть использованы в масштабе континуума, чтобы повысить точность моделей [28].

Реагирующим потоком называют течения, в которых происходят химические реакции. Различают два вида реакций в реагирующих потоках: гетерогенный и гомогенный. Гомогенная реакция – реагирующие компоненты (реагенты) находятся в одной фазе, реакция происходит по всему объему. Гетерогенная реакция – реагирующие компоненты находятся в разных фазах, реакция происходит на границе раздела фаз [29]. Именно гетерогенной реакции и идентификации скоростей реакции будет посвящена наша работа. Различают несколько типов гетерогенных реакций в зависимости от фазового состояния реагентов. Мы будем рассматривать систему «жидкая фаза - твердая фаза» с соответствующими ей процессами адсорбции и десорбции [30]. Адсорбция и десорбция – это процесс поглощения раствора (адсорбата) поверхностным слоем твердого тела (адсорбента) и обратный процесс отделения адсорбата из адсорбента соответственно [31]. Существует еще процесс абсорбции, когда абсорбент поглощает другое вещество (абсорбат) всем своим объемом, но он возникает в системах газ-жидкость и в этой работе рассматриваться не будет.

Реагирующий поток в пористых средах широко распространен в научных и инженерных областях и является важным компонентом многих промышленных и экологических проблем: очистка воды и воздуха от примесей [32], загрязнение почвы и рекультивация [33], каталитические фильтры [34, 35], опреснение морской воды [36], добыча нефти [3] и так далее. Во всех упомянутых промышленных процессах адсорбции крайне важно знать адсорбционную способность адсорбента и кинетику процесса. Исследование взаимодействий между адсорбатом и адсорбентом показало, что наиболее значимы изотермы адсорбции. Изотермы адсорбции представляют собой функциональные выражения, связывающие количество растворенного вещества, адсорбированного на единицу веса адсорбента, и концентрацию адсорбата в объеме раствора при постоянной температуре в условиях равновесия [37]. Таким образом, изотермы адсорбции предоставляют исследователям и инженерам возможность моделирования про-

цесса адсорбции в различных условиях эксплуатации, которые можно применять для проектирования, оптимизации и устранения неполадок.

Исследования по гидродинамике в пористых средах проводятся в различных направлениях. Авторы работ [38–41] численно исследовали течение жидкости через пористую среду методом усреднения объема. В работе [42] выполнен теоретический вывод закона Дарси из усредненного по объему уравнения движения без каких-либо определяющих предположений. Авторы [43, 44] обобщили уравнение Навье-Стокса для ламинарного течения сквозь пористую среду на идеализированной геометрии используя методологию усреднения объема. В работе [45] рассмотрены уравнения Бринкмана для ламинарного течения несжимаемой жидкости в пористой среде. Автор [46] численно исследовал несжимаемое течение через неупорядоченные пористые среды решеточным методом Больцмана. В недавних работах [47–50] численно изучались явления порового течения в специально смоделированных пористых средах.

В последние десятилетия многомасштабные методы получили широкое развитие для снижения стоимости численного моделирования задач без потери точности. Среди всех многомасштабных методов методы гомогенизации признаны эффективными и применимыми к различным задачам. Метод математической гомогенизации, известный как асимптотическая гомогенизация, был успешно использован для моделирования физических проблем, включая геометрическое и материальное нелинейное поведение [51, 52], термомеханическое поведение пористых материалов [53, 54], асимптотическое усреднение высшего порядка [55, 56] и усреднение высшего порядка для задачи радиационно-кондуктивного теплопереноса [57].

Важность процесса адсорбции вызывает чрезвычайные усилия по моделированию изотерм адсорбции на протяжении многих лет. Было предложено множество изотерм адсорбции и эти исследования активно продолжаются. Изотерма Генри, самая основная изотерма адсорбции, применима для низких кон-

центраций адсорбата. Изотерма Ленгмюра является более сложной изотермой по сравнению с изотермой Генри и применима для однородной поверхности. Существуют другие модели, например: Фрейндлиха, Харкинса-Юры, Халси, Дубинина-Радушкевича, Сипса, Йоссенса и Марчевского-Яроника и Тота, которые подходят для гетерогенных адсорбционных систем [58]. В своей работе мы будем рассматривать изотермы Генри и Ленгмюра.

Моделирование в масштабе пор обычно требует очень подробную вычислительную сетку. Более того, количество узлов сетки резко увеличится, если разрешение будет дополнительно улучшено, чтобы включить больше деталей геометрии. Таким образом, снижение вычислительной нагрузки без ущерба для точности вычислений крайне необходимо для моделирования в наше время [13]. Следовательно, необходима разработка новых эффективных вычислительных алгоритмов. Были предложены различные подходы для экономии вычислительных ресурсов моделирования в масштабе пор [59, 60] с использованием метода конечных объемов и решетчатого метода Больцмана. Кроме того, методы машинного обучения также были применены для моделирования в масштабе пор для ускорения прогнозирования транспортных свойств пористой среды [61, 62].

Детальное моделирование в масштабе пор требует эффективного метода трехмерной реконструкции. Для реконструкции одним из основных препятствий является низкое разрешение трехмерной микроструктуры. Несмотря на все большую доступность устройств для компьютерной томографии, их разрешения трехмерной реконструированной микроструктуры все еще недостаточно [13, 63]. Для получения надежных кинетических данных, в нашем случае скорости поверхностных реакций, необходимо очень точно контролировать условия реакции в экспериментальных установках. Это сложно по трем основным причинам: во-первых, одновременно с рассматриваемой химической реакцией происходят различные другие процессы, которые мешают контролю

условий реакции; во-вторых, концентрация и давление не могут быть измерены непосредственно в образце; в-третьих, условия реакции могут происходить неравномерно внутри образца из-за неоднородностей. Следовательно, требуется разработать эффективные алгоритмы идентификации ключевых параметров определяющих кинетику реакций, которые бы учитывали вышеизложенные нюансы экспериментальных исследований [64].

Численные модели в масштабе пор основаны на таких принципах сохранения, как сохранение массы, импульса и тепловой энергии. Определяющие уравнения для различных величин могут быть представлены в виде уравнений конвекции-диффузии-реакции. Неизвестными величинами могут быть температура или концентрация различных компонент. Уравнения сохранения массы и импульса также известны как уравнение Навье-Стокса [13]. За процесс реакции отвечают отдельные модели, которые могут быть заданы на границах включений в случае процессов адсорбции, или в области неоднородностей для случая абсорбции. Выбор этих моделей в большинстве своем зависит от типа адсорбента и адсорбата, порядка реакции и типа интерфейса [22, 65].

При прямой визуализации трехмерные микроструктуры пористой среды получают с помощью экспериментальных методов визуализации, таких как: XCT [66], FIB-SEM [67] и электронная томография [68]. XCT — это неинвазивный и неразрушающий метод визуализации, который может предоставить детали структуры внутри пористой среды. Пористая среда визуализируется с разных направлений для создания последовательных двухмерных поперечных сечений, которые впоследствии объединяются вместе для формирования трехмерной структуры. Разрешение микро-КТ и нано-КТ составляет 1–5 мкм и 10–20 нм соответственно. Помимо визуализации структур, XCT также широко применяется для исследования многофазных течений в пористой среде [69]. Описанные методы помогают хорошо понять морфологию пористых структур, однако, для оценки изменчивости связанной с геометрией и составляющими

пористых сред требуются многочисленные эксперименты для анализа статистических характеристик пористых сред, которые всё еще остается весьма дорогим и времязатратным процессом [70]. Создание синтетических пористых сред, которые отвечают всем свойствам реальной геометрии, позволяют выполнять многократное моделирование в различных условиях и с множественной параметризацией. Также синтетические пористые среды могут быть легко приведены к любым пространственным масштабам, поскольку пространственные параметры модели играют довольно важную роль в изучении физических процессов, протекающих в пористых средах [71].

Для моделирования процессов проходящих в пористых средах можно применять почти все существующие методы дискретизаций по пространству. В силу того, что изображения компьютерной томографии легче обрабатывать в вокселях (пиксель - воксель), метод конечных объемов особенно подходит для задач гидродинамики. Основным преимуществом метода является то, что законы сохранения выполняются локально и на дискретном уровне. Это особенно важно в промышленных задачах, где, например, недопустима потеря массы при вычислениях [72].

Метод конечных элементов на текущий момент является эталоном численных методов, объединяя в себе научный и инженерные подходы [73–75], поскольку хорошо подходит для решения задач на неструктурированной сетке с возможностью измельчения локального размера ячеек в отдельно взятых подобластях. Единственным недостатком метода конечных элементов можно назвать сложность программной реализации в отличии от других численных методов. На сегодняшний день этим недостатком можно пренебречь, поскольку появились вычислительные платформы, которые берут на себя рутинные моменты метода, давая исследователю возможность больше концентрироваться на решаемой задаче [76–78]. Несмотря на вышеописанные преимущества метода конечных объемов при работе с вокселями, метод конечных элементов тоже может

быть применен к работе с изображениями компьютерной томографии, разбивая воксель на 6 тетраэдров или используя кубические конечные элементы.

Оценка параметров является важной проблемой в научных вычислениях. Во многих случаях, слабым местом в реализации вычислительного моделирования реакционного переноса является отсутствие данных для скорости адсорбции и десорбции в масштабе пор. Несмотря на прогресс в разработке устройств для проведения экспериментальных измерений в масштабе пор, экспериментальная характеристика этих ключевых параметров все еще остается очень сложной и дорогой задачей. Типичными проблемами являются оценка скоростей реакций и оценка коэффициентов диффузии. Поскольку используемая система уравнений обычно очень сложна, возникает потребность в создании эффективных вычислительных алгоритмов решения задач оценки параметров [79]. Кроме того, задачи математического моделирования реакционных процессов в масштабе пор требуют соответствующей дискретизации и алгоритмов оптимизации. Для расчетов в двух- и трехмерных областях были предложены следующие алгоритмы: автоматического измельчения сетки [80] и понижения порядка модели многомасштабным методом конечных элементов [81].

Геометрический фактор проиллюстрируем на примере фильтрационного элемента. Каталитические системы работают по принципу поверхностных реакций, разлагая вредные соединения на более простые и менее опасные для человека [34, 35]. Такие фильтры обычно покрыты оксидами палладия, титана и т.д. (зависит от того, что необходимо очищать: выхлопные газы, воздух) для увеличения площади рабочего контакта, следовательно, имеют микромасштабную структуру. Стандартный подход моделирования сегодня явно не рассматривает микроструктуру пористых сред, а использует приближенные однородные модели, которые представляют микромасштабную структуру с точки зрения усредненных по объему величин. В этом усредненном подходе микромасштабные эффекты обычно включаются в эффективные усредненные по объему

коэффициенты диффузии и скорости реакций. Хотя эти однородные описания микромасштабов часто являются успешными и достаточными, при описании поведения, например, химического реактора в более мелком масштабе, учитывающем микроструктуру катализатора, требуется применение математических моделей, которые явно разрешают масштаб пор.

В случае поверхностных реакций в масштабе пор перенос частиц связан с поверхностной реакцией и учитывается граничными условиями. Когда скорости реакции неизвестны, их идентификация рассматривается как обратная краевая задача [82–87]. Дополнительная информация, необходимая для идентификации параметров, часто предоставляется в виде динамического изменения концентрации на выходе катализатора (например, так называемые кривые прорыва). В литературе обратные задачи для течения пористой среды обсуждаются, в основном, в связи с идентификацией параметров для макроскопических задач масштаба Дарси. Общий обзор всей тематики обратных задач при моделировании подземных вод в масштабе Дарси можно найти в [88].

В задачах реакционного течения, где необходимо определить кинетику реакции, либо наоборот, по известной кинетике определить работу фильтрационного элемента, так или иначе присутствует так называемая кривая прорыва/проскока. Существует несколько способов провести экспериментальные исследования кинетики реакций в объекте исследования, некоторые из которых описаны в работах [64, 89, 90]. В общей схеме, через объект исследования пропускают раствор или газ с известной концентрацией, попутно фиксируя концентрацию на выходе. Эта динамика в последующем может сыграть роль дополнительной информации для решения задачи идентификации ключевых параметров кинетики реакции. Естественно, вся другая доступная информация (температура среды, давление и т.д) при численном моделировании должна быть учтена.

Экспериментальные измерения могут иметь систематические ошибки. Слу-

чайные ошибки в экспериментальных измерениях, особенно с небольшим набором данных, также могут оказывать существенное влияние на результаты [91]. Все экспериментальные измерения имеют систематические ошибки, связанные с приборами или людьми-операторами. Это приводит к смещению параметров подобранной эмпирической модели [92, 93]. Также природные неоднородности самого объекта могут влиять на результат экспериментальных исследований. Эти эффекты труднее всего поддаются количественной оценке [64]. Несмотря на наличие справочников передового опыта по проведению экспериментов по определению кинетики реакций [94, 95], ошибки измерений не могут быть полностью устранены путем корректировки процедуры эксперимента. Расчетные методы могут помочь уточнить кинетические данные.

Кратко упомянем некоторые общие подходы к решению обратных задач, которые могут использоваться при идентификации параметров распределенных математических моделей. Для решения задач идентификации параметров могут применяться различные алгоритмы (см., например, [96–99]). Градиентные методы минимизации функционала от разности измеренных и вычисленных величин (функционала невязки) широко используются для решения обратных задач. В отличие от этого подхода наша цель состоит не в том, чтобы точно найти минимум функционала, а в том, чтобы выявить допустимый набор параметров, при котором функционал меньше заданного порога. Такой класс задач идентификации параметров представляет интерес для некоторых отраслей промышленности. Отметим также, что в зависимости от конкретной отрасли, разумный порог точности искомых параметров может варьироваться от 1% до 20%.

Многие алгоритмы идентификации параметров используют детерминированные методы, основанные на методе регуляризации Тихонова [100, 101], и нацелены на минимизацию функционала невязки между измеренными и вычисленными величинами. Важной частью таких алгоритмов является определение

допустимого набора параметров, на котором функционал минимизируется. При приближенном решении задач оптимизации [102, 103] используются процедуры локальной или глобальной оптимизации. В вычислительном плане можно отметить определенное сходство между математической постановкой задачи оптимизации и задачи идентификации параметров.

Стохастико-детерминированные методы также являются популярным подходом для решения задач идентификации параметров. Вариант метода, основанный на детерминированной выборке точек, выглядит подходящим для рассматриваемых нами прикладных задач. Стохастический подход к глобальной оптимизации в его простейшей форме состоит только из случайного поиска и называется чистым случайным поиском (Pure Random Search, PRS) [104]. В этом случае функционал невязки оценивается в случайно выбранных точках из допустимого набора. Последовательности Соболя [105, 106] могут использоваться для выборки. Такой подход успешно применяется, например, при многокритериальной идентификации параметров [107].

Количественная оценка неопределенности (Uncertainty Quantification, UQ) — важная область исследований во многих приложениях [92, 93]. Обычно используемый метод для UQ — это байесовская инверсия (байесовский вывод, байесовский подход), которая формулирует апостериорное распределение через условную вероятность и априорную информацию [108, 109]. Для выборки из апостериорного распределения часто используется метод Монте-Карло на цепях Маркова (Markov chain Monte–Carlo, MCMC) [110–113], который становится все более популярным методом получения информации о распределениях, особенно для оценки апостериорных распределений в байесовском подходе [114].

В задачах оптимизации, в последнее время, набирают большую популярность метаэвристические методы. Метаэвристика — это независящая от задачи алгоритмическая структура высокого уровня, которая предоставляет набор ре-

комендаций или стратегий для разработки алгоритмов оптимизации. Существуют различные метаэвристические алгоритмы: генетические алгоритмы (Genetic Algorithms, GA) [115], оптимизация роя частиц (Particle Swarm Optimization, PSO) [116], генетическое программирование (Genetic Programming, GP) [117], дифференциальная эволюция (Differential Evolution, DE) [118] и жадная рандомизированная адаптивная процедура поиска (Greedy Randomized Adaptive Search Procedure, GRASP) [119], и это лишь некоторые из них. Вот некоторые примеры недавних работ: алгоритмы DE и искусственной пчелиной колонии (ABC) использовались для определения кинетических параметров при гидрировании *CO2* для производства углеводородов [120]; PSO использовался для калибровки параметров модели анаэробного сбраживания [121]; а GRASP использовался для прогнозирования маршрута после стихийного бедствия для многопериодной задачи планирования работы войск на примере города Порт-о-Пренс на Гаити после землетрясения 2010 года [122]. Дополнительную информацию о метаэвристических алгоритмах можно найти в следующих работах [123–126].

Цель диссертационной работы состоит в разработке вычислительных алгоритмов для численного решения многомерных задач идентификации параметров поверхностной реакции реагирующего потока в пористых средах в масштабе пор. Необходимо исследовать влияние шума в экспериментальных данных на точность определяемых параметров, количественно оценить неопределенности. Заявленная цель достигается решением следующих задач:

- Разработка программного обеспечения для генерации вычислительных сеток синтетической пористой среды для двумерной и трехмерной задачи;
- Решение прямой задачи массопереноса реагирующего потока в пористой среде;
- Вычислительная реализация детерминированного, статистического и сто-

хастического подходов идентификации неизвестных скоростей адсорбции и десорбции в масштабе пор;

- Разработка вычислительного алгоритма по определению области допустимых значений параметров гетерогенных реакций.

Научная новизна и практическая значимость. Научная новизна полученных результатов заключается в следующем:

- Разработаны вычислительные алгоритмы идентификации параметров адсорбции и десорбции в масштабе пор с учетом влияния шума в экспериментальных данных на основе оценки области допустимых значений параметров через заданный порог. Сам порог определяется через априорную оценку значения функционала невязки с учетом дисперсии шума в экспериментальных данных;
- Дана Байесовская оценка ключевых параметров изотермы реакции для реагирующего потока через доверительный интервал при наличии одного или нескольких наборов экспериментальных данных с разными амплитудами шума;
- Предложена модификация метаэвристического алгоритма, адаптированная для задач реагирующего потока в масштабе пор для эффективного решения обратной задачи идентификации параметров поверхностной реакции.

Разработанные подходы имеют практическую значимость в исследовании новых сорбентов в промышленности и могут быть применены не только в средах со случайным расположением адсорбентов, но и при обработке изображений полученных с помощью компьютерной томографии от реальных объектов.

Методология и методы исследования. Разработка вычислительных алгоритмов проведена на основе современных вычислительных технологий. Дискретизация по пространству проводится методом конечных элементов на неструктурированной расчетной сетке, при дискретизации по времени исполь-

зуется разностная схема второго порядка точности (схема Кранка-Николсон). Для проверки вычислительных алгоритмов были сгенерированы синтетические экспериментальные данные кривой прорыва (средней концентрации раствора проходящего через границу выхода) с разными амплитудами шума для исследования их влияния на процесс идентификации. Исследование проведено на основе идеализированной геометрии пористой среды в виде периодических включений. Для построения расчетной области с последующей генерацией вычислительной сетки используется собственная программа для ЭВМ [127] основанная на свободном программном обеспечении Gmsh [78]. Исследовательский программный комплекс реализован на языке программирования Python с использованием вычислительной платформы с открытым исходным кодом FEniCS [76].

Положения, выносимые на защиту:

- Вычислительная идентификация параметров скоростей поверхностной реакции при массопереносе в пористой среде на основе наблюдения кривых проскока. Оценены возможности детерминированного, стохастического и многоступенчатых подходов на двумерных задачах. Вычислительные алгоритмы адаптированы к выделению области допустимых параметров, вместо нахождения одного вектора параметров;
- Байесовский подход идентификации параметров скоростей поверхностной реакции при массопереносе в пористой среде с использованием выборки полученной методом Монте-Карло на цепи Маркова. Выполнено сравнение двух алгоритмов построения выборки: Метрополис-Гастингс и Адаптивный Метрополис через функции автокорреляции, скорости приема и доверительные интервалы. Область допустимых параметров определяется через доверительный интервал и дается количественная оценка неопределенности возникающей из экспериментальных данных с гауссовским шумом;

- Модификация метаэвристического алгоритма стандартной пчелиной колонии (Standard Bees Algorithm, SBA) под названием модифицированный алгоритм пчелиной колонии (Modified Bee Colony, MBC) и её применение для задачи идентификации параметров скоростей реакции массопереноса в пористой среде. Отдельно рассмотрены случаи преобладания реакции и преобладания диффузии. Выполнен статистический сравнительный анализ с двумя пчелиными метаэвристическими алгоритмами: с оригинальным алгоритмом стандартной пчелиной колонии (Standard Bees Algorithm, SBA) и искусственной пчелиной колонией (Artificial Bee Colony, ABC).

Обоснованность и достоверность результатов обеспечена использованием корректно построенных математических моделей, подтверждена вычислительными экспериментами, которые приближены к реальным, а также путем сравнения результатов, полученных с использованием предлагаемых методов, с результатами прямого численного моделирования методом конечных элементов на эталонной сетке.

Апробация работы. Основные результаты диссертации докладывались на следующих конференциях:

- XII Международная конференция "Large-Scale Scientific Computing", Созополь, Болгария, 10.06.2019 – 14.06.2019;
- Международная конференция "Multiscale and high-performance computing for multiphysical problems", Якутск, Россия, 24.06.2019 - 25.06.2019;
- Международная конференция "Multiscale and high-performance computing", Сочи, Россия, 08.09.2020 - 13.09.2020;
- Международная конференция "Multiscale and high-performance computing for multiphysical problems", Якутск, Россия, 07.12.2020;
- Международная конференция "Mathematical Modeling, Inverse Problems and Big Data", Якутск, Россия, 18.07.2021-25.07.2021.

Публикации. По теме диссертации опубликованы 4 научные работы в международных научных изданиях включенных в систему цитирования Web of Science и Scopus [22, 128–130], получено свидетельство о государственной регистрации программ для ЭВМ [127].

Личный вклад автора. В работах опубликованных в соавторстве, личный вклад диссертанта состоит в следующем:

- в работе [22] разработал и реализовал стохастический и статистический методы идентификации параметров;
- в работе [128] принял участие в численной реализации математической модели, провел расчеты и анализ результатов вычислительных экспериментов;
- в работах [129, 130] выполнил выбор рассматриваемых методов идентификации параметров, обеспечил численную реализацию, провел расчеты и анализ результатов вычислительных экспериментов;
- в работе [127] руководил разработкой и написал алгоритмическую часть.

Подготовка к опубликованию полученных результатов проводилась совместно с соавторами.

Структура и объем диссертации. Работа состоит из введения, четырех глав, заключения и списка литературы. Общий объём диссертационной работы составляет 142 страницы, содержит 45 иллюстраций, 11 таблиц и 3 алгоритма. Список литературы содержит 177 наименований.

Работа была поддержана Мегагрантом Правительства РФ 14.Y26.31.0013, грантом РФФИ 19-31-90108.

В **первой главе** рассмотрен двумерный перенос растворенного вещества в масштабе пор с учетом поверхностных реакций, а именно, адсорбции и десорбции. Реализована математическая модель для описания процессов адсорбции и десорбции в масштабе пор при очистке жидкости. Вычислительная область состоит из периодически расположенных включений, которые игра-

ют роль адсорбентов. В рамках работы над диссертацией написана программа для ЭВМ с графическим пользовательским интерфейсом "Synthetic porosity by spherical particles"для создания двумерных/трехмерных синтетических пористых/неоднородных сред со сферическими частицами. С помощью этой программы построена вычислительная сетка. Исследованы процессы массопереноса в масштабе пор, когда ламинарное течение рассматривается в установившемся режиме. Гидродинамические процессы описываются стационарными уравнениями Стокса для несжимаемой жидкости. Для описания динамики примесей в потоке используются уравнения конвекции-диффузии, а реакция моделируется как нелинейное граничное условие третьего рода на границах включений. Рассматривается односторонняя связь: поток жидкости влияет на перенос вещества, но нет обратного влияния концентрации веществ на поток жидкости. Дискретизация по пространству выполняется методом конечных элементов, а для дискретизации по времени используется схема Кранка-Николсон, которая имеет второй порядок точности. Проводятся численные исследования прямой задачи массопереноса в пористых средах: расчеты на серии сеток, расчеты на разных шагах по времени, при различных параметрах для изучения их влияния на реагирующий поток через пористую среду.

Во **второй главе** рассмотрена обратная задача определения неизвестной скорости адсорбции и десорбции (так называемая задача идентификации параметров), используя информацию о динамике средней выходной концентрации. Решение обратной задачи состоит в минимизации функционала невязки между измеренными и вычисленными данными. Отправной точкой является отслеживание невязки для двух разных значений параметров в изотерме Генри. Рассмотрен детерминированный подход, когда пространство параметров дискретизируется равномерной сеткой и для каждой пары параметров вычисляется значение невязки. Способ является простейшим, но в то же время является весьма дорогостоящим подходом. Рассмотрен стохастический подход в

виде чистого случайного поиска и статистический подход с использованием выборки квазислучайных последовательностей Соболя из пространства искомых параметров. Проведена процедура Монте-Карло для исследования неопределенностей исходящих из стохастики в шуме. В рассматриваемом нами классе задач важно определять не отдельные параметры, а определить именно допустимую область параметров. Это особенно актуально в случае зашумленных экспериментальных данных. Для всех подходов исследованы влияния шумов в экспериментальных данных на процедуру идентификации допустимых наборов параметров, где допустимый набор параметров определяется через установленный порог. Сам порог определяется с помощью априорной оценки функционала невязки с учетом дисперсии равномерно распределенной случайной величины шума в экспериментальных данных. Определение допустимого набора параметров удовлетворяет целям промышленности, где необходимо определять параметры с точностью порядка шума.

В **третьей главе** рассмотрен Байесовский подход в оценке параметров адсорбции и десорбции с количественной оценкой неопределенности. Выборка с апостериорного распределения получена методом Монте-Карло на цепи Маркова. Реализованы два алгоритма для построения выборки: Метрополис-Гастингс (Metropolis-Hastings, MH) и Адаптивный Метрополис (Adaptive Metropolis, AM). Рассмотрено влияние шума с разной дисперсией на процедуру идентификации. Проведены сравнения между двумя алгоритмами через функцию автокорреляции. Область допустимых значений определяется через доверительный интервал для обоих алгоритмов. Исследовано влияние количества экспериментальных данных для уточнения области допустимых значений. Выполнен анализ выборки с использованием автокорреляционной функции, также проведен анализ скорости приема для оценки смешения цепи Маркова. Установлено, что выборка MCMC (Markov chain Monte-Carlo) достаточно хороша для определения допустимого набора параметров через доверительный интервал для обоих

алгоритмов, однако, предпочтительнее Адаптивный Метрополис, поскольку в нем нет необходимости в "настройках"алгоритма.

В **четвертой главе** предложена модификация стандартного алгоритма пчелиного роя (Standard Bees Algorithm, BA) [131], которая является поведенческим методом. Поведенческие методы — это многоагентные методы, основанные на моделировании интеллектуального поведения колоний агентов (интеллект роя). Модификация предлагает более агрессивный поиск не только глобального экстремума функционала невязки, но и локальных экстремумов. Тестовые запуски на известных тестовых функциях явно демонстрируют это свойство. Проведено статистическое сравнение предложенного алгоритма с двумя другими концептуально различными пчелиными алгоритмами на 100 независимых прогонах тестовых функций. Предложенная модификация хорошо справляется с определением области допустимых значений при условии умеренного количества экстремумов. Модифицированный алгоритм применен для минимизации функционала невязки в случае доминирующей диффузии, когда функционал выпуклый, и в случае доминирующей реакции, когда функционал имеет форму узкой долины с крутыми берегами.

В **заключении** сформулированы основные научные результаты работы.

Автор выражает искреннюю благодарность своему научному руководителю, доктору физико-математических наук, профессору Петру Николаевичу Вабищевичу за научное руководство и доктору физико-математических наук, профессору Олегу Илиеву за наставничество, профессору Ялчину Эфендиеву за плодотворные дискуссии. Автор выражает благодарность своим коллегам по научно-исследовательской кафедре «Вычислительные технологии» ИМИ СВФУ и сотрудникам международной научно-исследовательской лаборатории «Многомасштабное математическое моделирование и компьютерные вычисления» за полезные советы, поддержку и помощь в улучшении своей работы.

Глава 1

Реагирующие потоки в пористых средах

В данной главе рассмотрен двумерный перенос растворенного вещества в масштабе пор с учетом поверхностных реакций, а именно, адсорбции и десорбции. Реализована математическая модель для описания процессов адсорбции и десорбции в масштабе пор при очистке жидкости. Вычислительная область состоит из периодически расположенных включений, которые играют роль адсорбентов. Исследованы процессы массопереноса в масштабе пор, когда ламинарное течение рассматривается в установившемся режиме. Гидродинамические процессы описываются стационарными уравнениями Стокса для несжимаемой жидкости. Для описания динамики примесей в потоке используются уравнения конвекции-диффузии, а реакция моделируется как нелинейное граничное условие третьего рода на границах включений. Рассматривается односторонняя связь: поток жидкости влияет на перенос вещества, но нет обратного влияния концентрации веществ на поток жидкости. Дискретизация по пространству выполняется методом конечных элементов, а для дискретизации по времени используется схема Кранка-Николсон, которая имеет второй порядок точности. Проводятся численные исследования прямой задачи массопереноса в пористых средах: расчеты на серии сеток, расчеты на разных шагах по времени, при различных значениях параметров для изучения их влияния на реагирующий поток через пористую среду [22, 127].

1.1 Математическая модель

Рассмотрим двумерный перенос через фильтрационную пластину растворенного вещества в масштабе пор при процессах поверхностных реакций. Координата вдоль пористой области (вертикальная) обозначена как x_2, а координата поперек пористой области (горизонтальная, совпадающая с направлением

средней скорости) обозначена как x_1. Схема рассматриваемой области Ω представлена на Рис. 1.1. Геометрия пористой среды моделируется как периодическое расположение цилиндров. Область Ω_f занимает жидкость, а область Ω_s описывает тело адсорбентов. Поверхности адсорбентов, где происходит реакция, обозначены Γ_s, а линии симметрии обозначены Γ_{sym}. Предполагается, что раствор вводится через входную границу Γ_{in}, а не прореагировавшая часть вещества вытекает через границу выхода Γ_{out}. Поскольку рассматриваются только поверхностные реакции, а именно, адсорбция и десорбция, раствор не всасывается адсорбентом. Поэтому, нет необходимости в дискредитации этих областей и расчетная область будет состоять только из Ω_f.

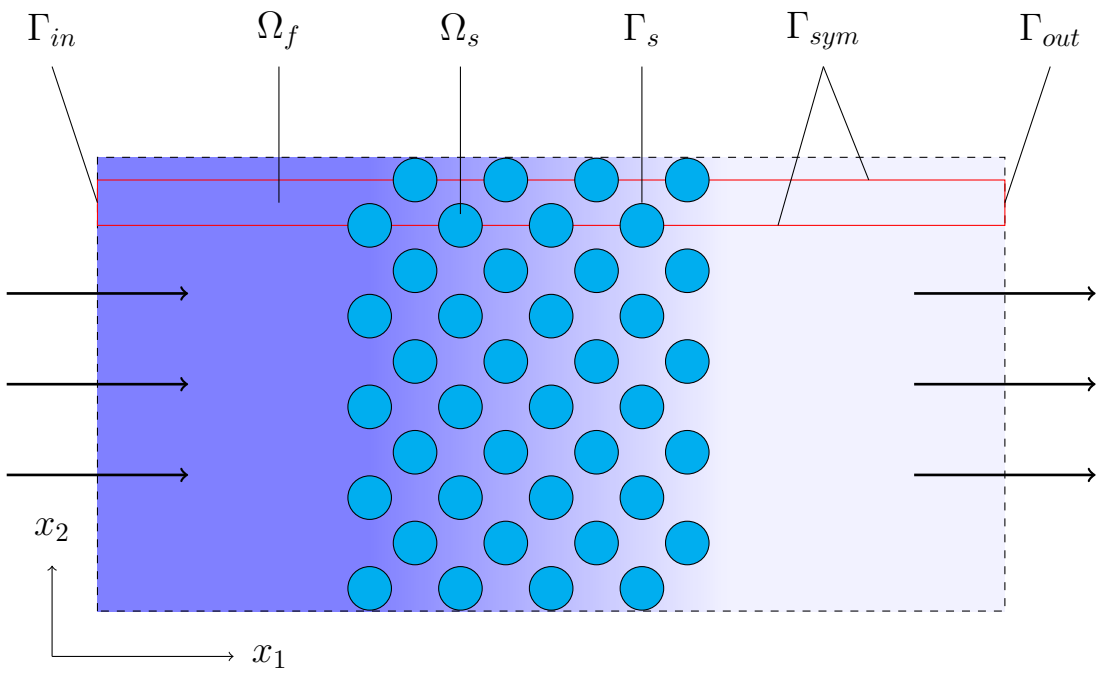


Рисунок 1.1: Эскиз области в масштабе пор.

Гидродинамические процессы

Течение в порах часто медленное, поэтому оно описывается стационарными уравнениями Стокса для несжимаемой жидкости:

$$\nabla p - \mu \nabla^2 \boldsymbol{u} = 0, \tag{1.1}$$

$$\nabla \cdot \boldsymbol{u} = 0, \quad \boldsymbol{x} \in \Omega_f, \tag{1.2}$$

где $\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x})$ и $p(\boldsymbol{x})$ — скорость жидкости и давление, соответственно, а μ является динамической вязкостью, которая предполагается постоянной [11, 132]. При моделировании потока в каталитических фильтрах жидкость тоже считается несжимаемой, так как перепад давления на стенке фильтра составляет порядка 1% по отношению к абсолютному давлению в системе [34].

Обозначим через $\boldsymbol{n}$ вектор внешней нормали к границе, через $\boldsymbol{\sigma}$ тензор вязких напряжений, который выглядит следующим образом

$$\boldsymbol{\sigma} = \mu \left(\nabla \boldsymbol{u} + (\nabla \boldsymbol{u})^T \right)$$

и сформулируем граничные условия на $\partial\Omega_f$. Скорость жидкости на входе $\bar{u}$ задается следующим образом:

$$\boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{n} = \bar{u}, \quad \boldsymbol{u} \times \boldsymbol{n} = 0, \quad \boldsymbol{x} \in \Gamma_{in}. \tag{1.3}$$

На выходе задано отсутствие нормальной и касательной силы:

$$p - \boldsymbol{\sigma n} \cdot \boldsymbol{n} = 0, \quad \boldsymbol{\sigma n} \times \boldsymbol{n} = 0, \quad \boldsymbol{x} \in \Gamma_{out}. \tag{1.4}$$

На стенках включений заданы стандартные условия твердых стенок:

$$\boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{n} = 0, \quad \boldsymbol{u} \times \boldsymbol{n} = 0, \quad \boldsymbol{x} \in \Gamma_s. \tag{1.5}$$

На границе симметрии расчетной области заданы условия симметрии:

$$\boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{n} = 0, \quad \boldsymbol{\sigma n} \times \boldsymbol{n} = 0, \quad \boldsymbol{x} \in \Gamma_{sim}. \tag{1.6}$$

Перенос примеси

Концентрация растворенного вещества в жидкости обозначается как $c(\boldsymbol{x}, t)$. Нестационарный перенос растворенного вещества для гетерогенной реакции описывается уравнением конвекции-диффузии:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla(\boldsymbol{u}c) - D\nabla^2 c = 0, \quad \boldsymbol{x} \in \Omega_f, \quad t > 0, \tag{1.7}$$

где $D > 0$ — коэффициент диффузии растворенного вещества, который считается скалярным и постоянным.

Предполагается, что концентрация растворенного вещества на входе $\bar{c} > 0$ известна:

$$c(\boldsymbol{x}, t) = \bar{c}, \quad \boldsymbol{x} \in \Gamma_{in}. \tag{1.8}$$

Нулевой диффузионный поток растворенного вещества на выходе и на внешних границах области (только конвективный перенос) задается следующим образом:

$$D\nabla c \cdot \boldsymbol{n} = 0, \quad \boldsymbol{x} \in \Gamma_{sim} \cup \Gamma_{out}. \tag{1.9}$$

Сам конвективный поток через выход разрешен неявно приведенными выше уравнениями. Поверхностные реакции, которые происходят на поверхности включений Γ_s, удовлетворяют закону сохранения массы. В данном конкретном случае это означает, что изменение адсорбированной поверхностной концентрации равно потоку от жидкости к поверхности. Массовый баланс на поверхности описывается как

$$\frac{\partial m}{\partial t} = -D\nabla c \cdot \boldsymbol{n}, \quad \boldsymbol{x} \in \Gamma_s, \tag{1.10}$$

где m — это поверхностная концентрация адсорбированного растворенного вещества [133]. Используется смешанное кинетико-диффузионное описание адсорбции:

$$\frac{\partial m}{\partial t} = f(c, m). \tag{1.11}$$

Для описания гетерогенной реакции выбор зависимости f от c и m имеет решающее значение для моделирования динамики реакции на границе "твердое тело – жидкость". Для описания этой динамики существует ряд различных изотерм (различных функций $f(c, m)$), в зависимости от свойств растворенного вещества, порядка реакции и типа интерфейса.

Простейшим из них является изотерма Генри, которая предполагает линейную зависимость между приповерхностной концентрацией и поверхностной

концентрацией адсорбированных частиц и принимает вид:

$$f(c, m) = k_a c - k_d m, \tag{1.12}$$

где $k_a \geq 0$ – скорость адсорбции, измеренная на единицу длины в единицу времени, и $k_d \geq 0$ – скорость десорбции, измеренная в единицу времени. Изотерма адсорбции Ленгмюра представляет собой более сложную трехпараметрическую модель:

$$f(c, m) = k_a c \left(1 - \frac{m}{m_\infty}\right) - k_d m, \tag{1.13}$$

где $m_\infty > 0$ – максимально возможная адсорбированная поверхностная концентрация. По сравнению с изотермой Генри (1.12), изотерма Ленгмюра (1.13) предсказывает снижение скорости адсорбции по мере увеличения адсорбированной концентрации из-за уменьшения доступной адсорбционной поверхности.

Постановка начально–краевой задачи в дополнение к основным уравнениям (1.1), (1.2), (1.7), граничным условиям (1.3)–(1.6), (1.8)–(1.11) и заданной изотерме (1.12) или (1.13), требует задания начальных условий:

$$c(\boldsymbol{x}, 0) = c_0(\boldsymbol{x}), \quad \boldsymbol{x} \in \Omega_f, \tag{1.14}$$

$$m(\boldsymbol{x}, 0) = m_0(\boldsymbol{x}), \quad \boldsymbol{x} \in \Gamma_s. \tag{1.15}$$

1.2 Обезразмеренные формы уравнений

Когда задача подобная описанной выше должна быть решена для ряда параметров, неоспоримые преимущества дает работа с безразмерной формой уравнений. Для безразмерных переменных (скорость, давление, концентрация) ниже используются те же обозначения, что и для размерных. Высота расчетной области Ω_f, а именно l, используется для масштабирования пространственных размеров, масштабирование скорости выполняется входной скоростью $\bar{u}$, а масштабирование концентрации выполняется по входной концентрации $\bar{c}$.

Уравнения Стокса (1.3) и граничные условия для него в безразмерном формате записываются относительно безразмерной скорости и давления:

$$\nabla p - \nabla^2 \boldsymbol{u} = 0, \tag{1.16}$$

$$\nabla \cdot \boldsymbol{u} = 0, \quad \boldsymbol{x} \in \Omega_f, \tag{1.17}$$

при выборе масштаба давления

$$\bar{p} = \frac{\mu \bar{u}}{l}.$$

В безразмерном виде тензор вязких напряжений преобразуется в

$$\boldsymbol{\sigma} = \nabla \boldsymbol{u} + (\nabla \boldsymbol{u})^T.$$

Граничное условие (1.3) дает

$$\boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{n} = 1, \quad \boldsymbol{u} \times \boldsymbol{n} = 0, \quad \boldsymbol{x} \in \Gamma_{in}, \tag{1.18}$$

а граничное условие (1.4) принимает вид

$$p - \boldsymbol{\sigma n} \cdot \boldsymbol{n} = 0, \quad \boldsymbol{\sigma n} \times \boldsymbol{n} = 0, \quad \boldsymbol{x} \in \Gamma_{out}. \tag{1.19}$$

Граничные условия (1.5) и (1.6) остаются неизменными:

$$\boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{n} = 0, \quad \boldsymbol{u} \times \boldsymbol{n} = 0, \quad \boldsymbol{x} \in \Gamma_s, \tag{1.20}$$

$$\boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{n} = 0, \quad \boldsymbol{\sigma n} \times \boldsymbol{n} = 0, \quad \boldsymbol{x} \in \Gamma_{sim}. \tag{1.21}$$

В безразмерной форме уравнение (1.7) принимает следующий вид:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla(\boldsymbol{u} c) - \frac{1}{\mathrm{Pe}} \nabla^2 c = 0, \quad \boldsymbol{x} \in \Omega_f, \quad t > 0, \tag{1.22}$$

где

$$\mathrm{Pe} = \frac{l \bar{u}}{D}$$

является числом Пекле.

Далее граничное условие (1.8) преобразуется в

$$c = 1, \quad \boldsymbol{x} \in \Gamma_{in}, \tag{1.23}$$

а граничное условие (1.9) принимает вид

$$\nabla c \cdot \boldsymbol{n} = 0, \quad \boldsymbol{x} \in \Gamma_{sim} \cup \Gamma_{out}. \tag{1.24}$$

Безразмерный вид уравнения (1.10) дается выражением

$$\frac{\partial m}{\partial t} = -\nabla c \cdot \boldsymbol{n}, \quad \boldsymbol{x} \in \Gamma_s, \tag{1.25}$$

где m масштабируется следующим образом:

$$\bar{m} = l\bar{c}.$$

В безразмерном виде адсорбционные соотношения, в случае изотермы Генри записываются следующим образом:

$$\frac{\partial m}{\partial t} = \mathrm{Da}_a c - \mathrm{Da}_d m, \quad \boldsymbol{x} \in \Gamma_s, \tag{1.26}$$

где адсорбционные и десорбционные числа Дамколера выражаются как

$$\mathrm{Da}_a = \frac{k_a}{\bar{u}}, \quad \mathrm{Da}_d = \frac{k_d l}{\bar{u}}.$$

В случае, когда мы рассматриваем изотерму Ленгмюра, (1.11), (1.13), используется следующее безразмерное соотношение

$$\frac{\partial m}{\partial t} = \mathrm{Da}_a c \left(1 - \frac{m}{\mathrm{M}}\right) - \mathrm{Da}_d m, \quad \boldsymbol{x} \in \Gamma_s, \tag{1.27}$$

где безразмерный параметр M определяется выражением

$$\mathrm{M} = \frac{m_\infty}{l\bar{c}}.$$

1.3 Вариационная формулировка

Перед построением конечно-элементной аппроксимации все уравнения необходимо привести к вариационному виду. Для этого определим стандартное Гильбертово пространство скалярных функций $L_2(\Omega)$ со скалярным произведением и нормой:

$$(u, v) = \int_\Omega u(\boldsymbol{x})v(\boldsymbol{x})dx, \quad \|u\| = (u, u)^{1/2}.$$

Определим соответствующее пространство векторных функций $\boldsymbol{L}_2(\Omega) = (L_2(\Omega))^2$. Далее определим пространства Соболева первого порядка $H^1(\Omega)$ для скалярных функций и $\boldsymbol{H}^1(\Omega)$ для векторных функций, необходимых для построения вариационной формулировки нашей задачи.

Стационарное течение однофазной жидкости

В нашей работе рассматривается односторонняя связь. Поток жидкости влияет на перенос веществ, но нет обратного влияния концентрации веществ на поток жидкости. Конечно-элементная аппроксимация стационарной задачи обтекания [134] основана на вариационной формулировке рассматриваемой краевой задачи (1.1)–(1.6). Следующее функциональное пространство $\boldsymbol{V}$ определено для скорости $\boldsymbol{u}$ ($\boldsymbol{u} \in \boldsymbol{V}$):

$$\boldsymbol{V} = \{\boldsymbol{u} \in \boldsymbol{H}^1(\Omega) : \boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{n} = 1,\ \boldsymbol{u} \times \boldsymbol{n} = 0 \text{ на } \Gamma_{in},$$
$$\boldsymbol{u} = 0 \text{ на } \Gamma_s,\ \boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{n} = 0 \text{ на } \Gamma_{sym}\}.$$

Тестовая функция $\boldsymbol{v} \in \hat{\boldsymbol{V}}$, где

$$\hat{\boldsymbol{V}} = \{\boldsymbol{v} \in \boldsymbol{H}^1(\Omega_f) :\ \boldsymbol{v} = 0 \text{ на } \Gamma_{in},\ \boldsymbol{v} = 0 \text{ на } \Gamma_s,\ \boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{n} = 0 \text{ на } \Gamma_{sym}\}.$$

Для давления p и соответствующей тестовой функции q требуется, чтобы $p, q \in Q$, где

$$Q = \{q \in L_2(\Omega_f) :\ q = 0 \text{ на } \Gamma_{out}\}.$$

Умножим уравнение (1.1) на $\boldsymbol{v}$, уравнение (1.2) на q, и проинтегрируем по вычислительной области. Беря во внимание граничные условия (1.3)–(1.6), получается следующая система уравнений относительно $\boldsymbol{v} \in \boldsymbol{V}$, $q \in Q$:

$$a(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}) - b(\boldsymbol{v}, p) = 0 \ \forall \boldsymbol{v} \in \hat{\boldsymbol{V}}, \tag{1.28}$$

$$b(\boldsymbol{u}, q) = 0 \ \forall q \in Q. \tag{1.29}$$

Для билинейных форм имеем

$$a(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}) := \int_{\Omega_f} \nabla \boldsymbol{u} \cdot \nabla \boldsymbol{v} \, d\boldsymbol{x},$$

$$b(\boldsymbol{v}, q) := \int_{\Omega_f} (\nabla \cdot \boldsymbol{v}) q \, d\boldsymbol{x}.$$

Реагирующий перенос

Проблема нестационарного переноса раствора (1.22)–(1.27) решается численно с использованием стандартных лагранжевых конечных элементов P_1. Определим

$$S = \{c \in H^1(\Omega_f) : \ c = 1 \text{ на } \Gamma_{in}\},$$

$$\hat{S} = \{s \in H^1(\Omega_f) : \ s = 0 \text{ на } \Gamma_{in}\}.$$

Приближенное решение $c \in S$ ищется из

$$\left(\frac{\partial c}{\partial t}, s\right) + d(c, s) = \left(\frac{\partial m}{\partial t}, s\right)_s \quad \forall s \in \hat{S}, \tag{1.30}$$

где используются следующие обозначения

$$d(c, s) := -\int_{\Omega_f} c\boldsymbol{u} \cdot \nabla s \, d\boldsymbol{x} + \frac{1}{\mathrm{Pe}} \int_{\Omega_f} \nabla c \cdot \nabla s \, d\boldsymbol{x} + \int_{\Gamma_{out}} (\boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{n}) cs \, d\boldsymbol{x},$$

$$(\varphi, s)_s := -\int_{\Gamma_s} \varphi s \, d\boldsymbol{x}.$$

Для определения $m \in G = L_2(\Gamma_s)$ (смотрите (1.11)) мы используем

$$\left(\frac{\partial m}{\partial t}, g\right)_s - (f(c, m), g)_s = 0, \quad g \in G. \tag{1.31}$$

Дискретизация по времени основана на симметричной аппроксимации (схема Кранка – Николсон), которая имеет второй порядок точности (см., например, [85, 135]). Пусть τ — шаг равномерной сетки по времени такой, что $c^n = c(t^n), t^n = n\tau,\ n = 0, 1, ...$

Уравнение (1.30) аппроксимируется по времени следующим образом

$$\left(\frac{c^{n+1} - c^n}{\tau}, s\right) + d\left(\frac{c^{n+1} + c^n}{2}, s\right) = \left(\frac{m^{n+1} - m^n}{\tau}, s\right)_s.$$

Аналогично для (1.31) мы получим

$$\left(\frac{m^{n+1} - m^n}{\tau}, g\right)_s - \left(f\left(\frac{c^{n+1} + c^n}{2}, \frac{m^{n+1} + m^n}{2}\right), g\right)_s = 0, \quad n = 0, 1, ...$$

В рассматриваемом нами случае ставятся однородные начальные условия

$$c^0 = 0, \quad \boldsymbol{x} \in \Omega_f,$$

$$m^0 = 0, \quad \boldsymbol{x} \in \Gamma_s.$$

1.4 Геометрия и вычислительная сетка

Специально для решения такого класса задач, было разработано и зарегистрировано программное обеспечение для операционных систем Windows и Linux под названием "Программа для ЭВМ: Synthetic porosity by spherical particles". Программа предназначена для создания синтетических пористых сред посредством добавления сферических частиц, имеет удобный пользовательский интерфейс и генерирует вычислительную сетку для последующего её использования в решении каких-либо задач методом конечных элементов. Программа открывает пользователю широкие возможности для создания сложных пористых сред: от периодически распределенных включений, до распределенных случайным образом. Генерацию пористой среды можно проводить в двумерном и трехмерном масштабе, область можно построить как перфорированную, так и неоднородную. Есть количественный контроль по включениям,

так и контроль по проценту пористости сгенерированной среды (см. Рис. 1.2, 1.3). Созданные с помощью программы вычислительные сетки могут использоваться в математических моделях по моделированию течений, массопереноса, реагирующих потоков, для прикладных задач на исследования таких явлений как электрофорез, электроосмос, рост оксидных слоев. Мы перечислили только малую часть задач, где требуется проводить моделирование с использованием пористых сред. Программа способна генерировать вычислительную сетку любой кучности (см. Рис. 1.4, 1.5), потенциал ограничен только мощностью компьютера, на котором идет создание геометрии и вычислительной сетки. Также реализован подсчет процента пористости прямо с геометрии сгенерированной среды, что весьма удобно для контроля, так как не требуется запускать ресурсозатратный процесс генерации вычислительной сетки в лишний раз. Программа разработана на языке программирования Python с использованием исходных кодов программы Gmsh [78], которая распространяется с открытым исходным кодом.

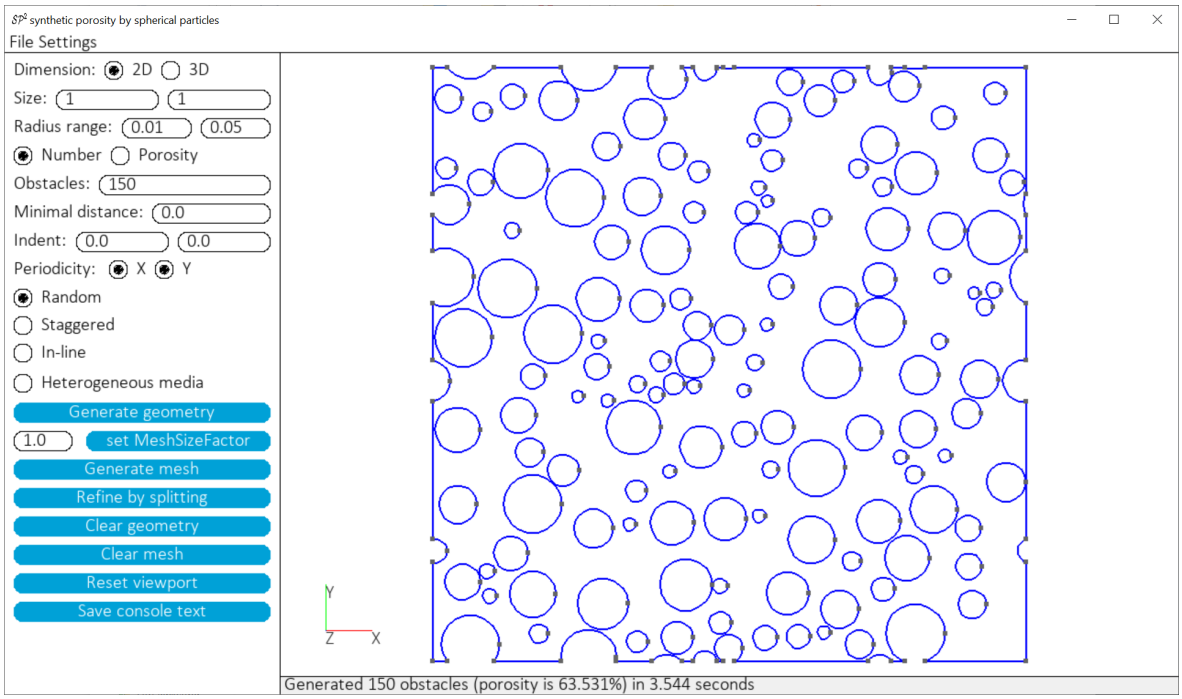


Рисунок 1.2: Контроль по количеству включений (сгенерировано 150 включений).

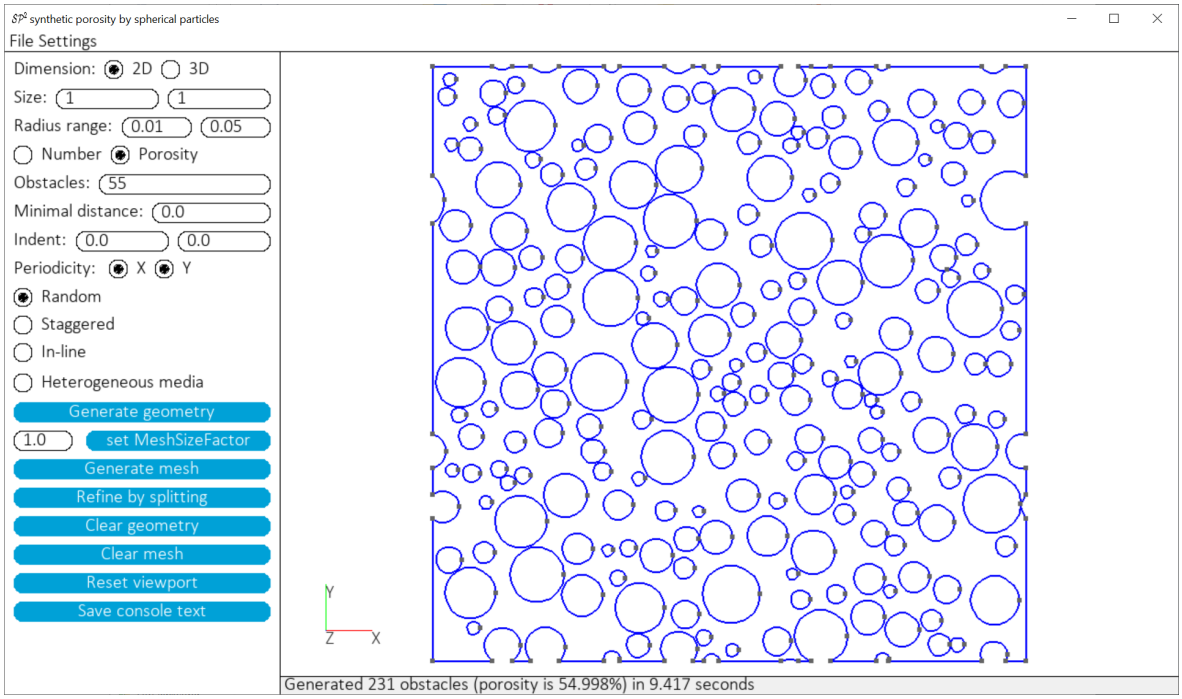


Рисунок 1.3: Контроль по проценту пористости среды (сгенерировано 231 включение для достижения 55% пористости).

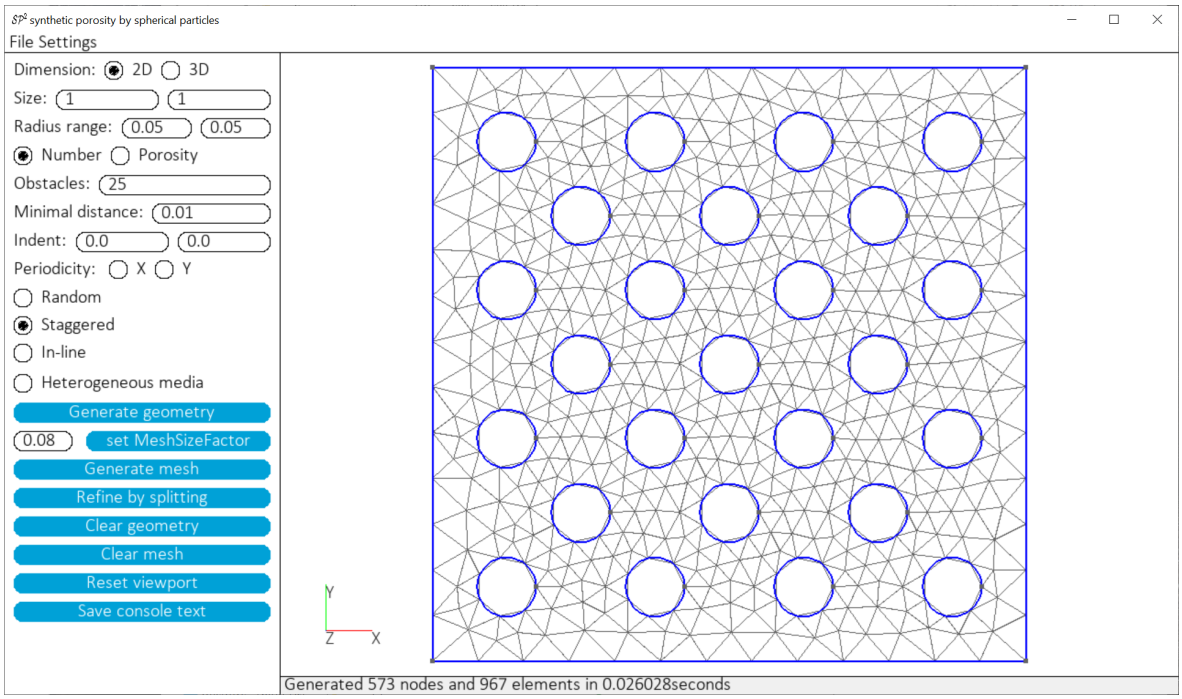


Рисунок 1.4: Пример грубой сетки.

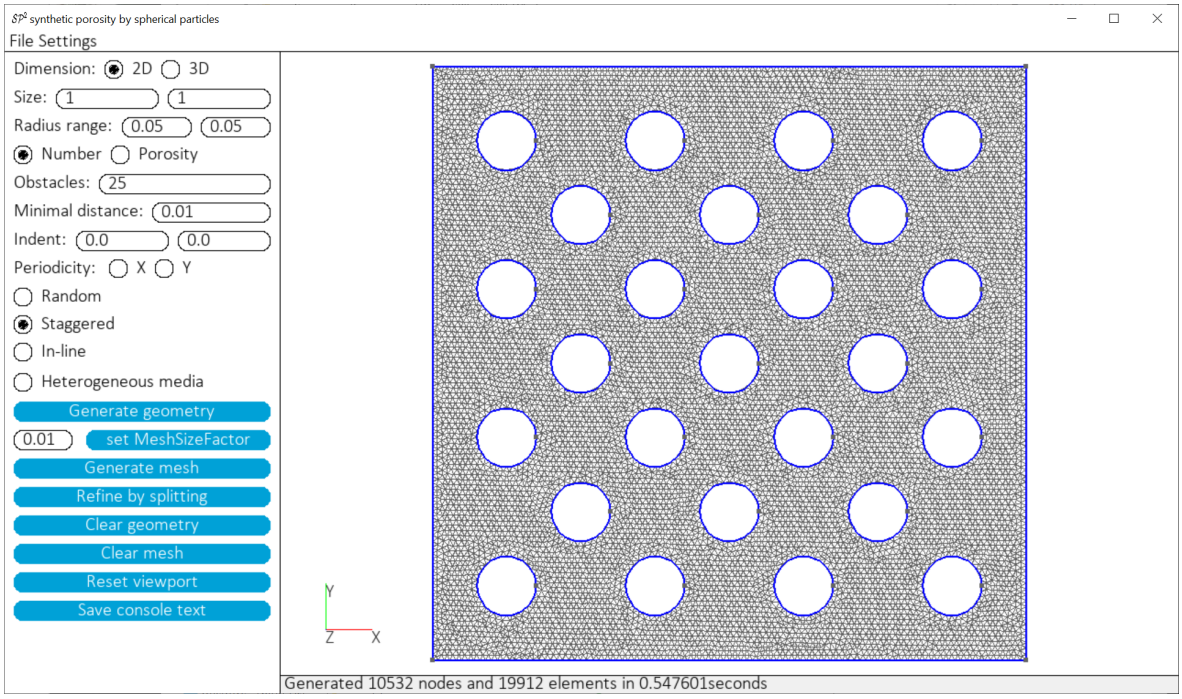


Рисунок 1.5: Пример мелкой сетки.

Расчетная область Ω_f представляет собой часть прямоугольника с безразмерной высотой $x_2 = 1$ и безразмерной длиной $x_1 = 17,5$, в который вложены десять полуцилиндров. Расстояние между центрами цилиндров в направлении x_1 составляет 1.5 безразмерных единицы, радиус цилиндров — 0.4 безразмерных единиц. Триангуляция и подготовка геометрии была проведена с помощью описанной ранее программы. Вычислительная сетка показана на Рис. 1.6.

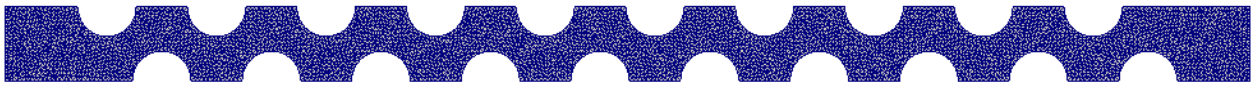


Рисунок 1.6: Вычислительная сетка.

1.5 Численный анализ модели

Для конечно-элементной аппроксимации скорости, давления и соответствующих тестовых функций выбраны следующие конечномерные подпространства $\boldsymbol{V}_h \subset \boldsymbol{V}$, $\hat{\boldsymbol{V}}_h \subset \hat{\boldsymbol{V}}$ и $Q_h \subset Q$. Использовались элементы Тейлора-Худа $P_2 - P_1$ [136]. Это непрерывные элементы Лагранжа P_2 для компонент скорости и непрерывные элементы P_1 Лагранжа для поля давления. Программное обеспечение подготовлено с использованием вычислительной платформы для уравнений в частных производных FEniCS [76, 137].

Расчетные составляющие скорости и давления показаны на Рис. 1.7. Сходимость решения относительно измельчения сетки иллюстрирует Рис. 1.8. Для контроля точности результатов расчеты выполняются на последовательно уточняемых сетках. Мы использовали три вычислительные сетки: базовую сетку с 18743 узлами и 35958 треугольниками, грубую сетку с 4760 узлами и 8754 треугольниками и мелкую сетку с 72745 узлами и 142460 треугольниками. Рисунок 1.8 показывает компоненты скорости и давления на средней линии расчетной области, вычисленные на мелкой сетке. Различия ($\delta u_1, \delta u_2, \delta p$) между решения-

ми, вычисленными на мелкой сетке, и решениями, вычисленными на базовой и крупной сетке, представлены для иллюстрации сходимости. Для удобства при визуализации эти различия умножены на 100. Из результатов можно сделать вывод, что базовая сетка обеспечивает хорошую точность численного решения.

Метод конечных элементов используется для пространственной дискретизации вышеупомянутой задачи вместе с неявной дискретизацией по времени. Изотерма адсорбции Генри (1.26) используется в расчетах, представленных ниже. Базовый набор параметров выглядит следующим образом:

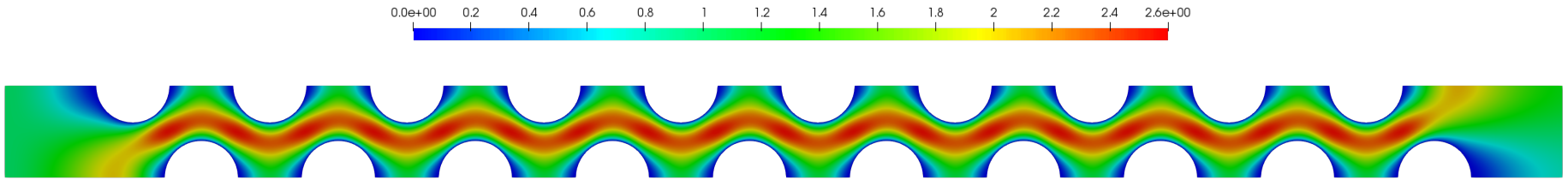
$$\mathrm{Pe} = 10, \quad \mathrm{Da}_a = 0.005, \quad \mathrm{Da}_d = 0.05.$$

Решается нестационарная задача на безразмерном интервале времени $(0, T)$, $T = 40$, с использованием временного шага $\tau = 0.1$. Кривая прорыва (т.е. средняя концентрация на выходе) используется для характеристики реагирующего потока:

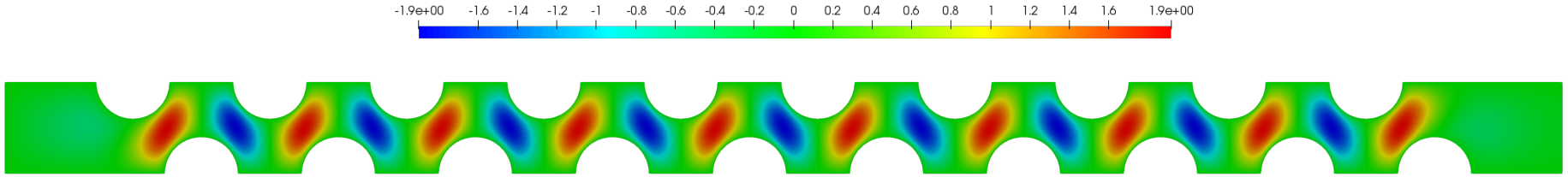
$$c_{out}(t) = \frac{\int_{\Gamma_{out}} c(\boldsymbol{x}, t) d\boldsymbol{x}}{\int_{\Gamma_{out}} d\boldsymbol{x}}. \tag{1.32}$$

Концентрации раствора в разные моменты времени показаны на Рис. 1.11. Точность приближенного решения по шагу по времени иллюстрируется на Рис. 1.12. Решение по средней линии расчетной области показано для случая $\tau = 0.05$, а также увеличенные в 100 раз различия между этим решением и решениями, полученными с помощью $\tau = 0.1$ и $\tau = 0.2$. Результаты показывают, что хорошей точности можно добиться используя $\tau = 0.1$. Дальнейшее моделирование выполняется с использованием этого временного шага.

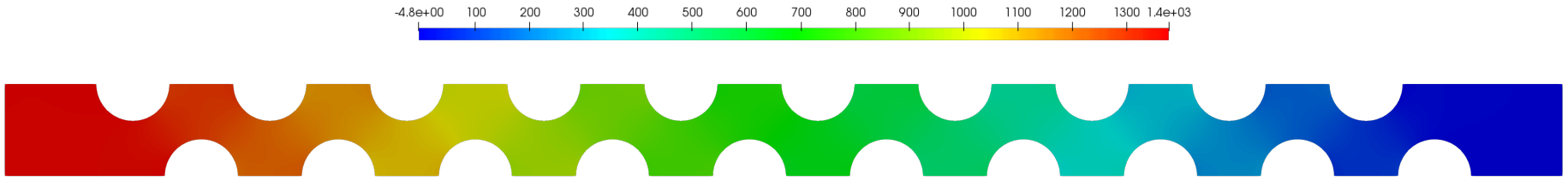
Исследование чувствительности проводится для того, чтобы увидеть, как изменение различных параметров приводит к изменению кривой прорыва. Такие исследования чувствительности часто являются первым этапом процедур оптимизации или определения параметров. Зависимость средней выходной концентрации от числа Пекле показана на Рис. 1.10а. Меньшее значение Pe означает большую диффузию, что хорошо иллюстрируется разбросом выход-



а)



б)



в)

Рисунок 1.7: Скорость и давление: а) горизонтальная составляющая вектора скорости u_1, б) вертикальная составляющая вектора скорости u_2, в) давление.

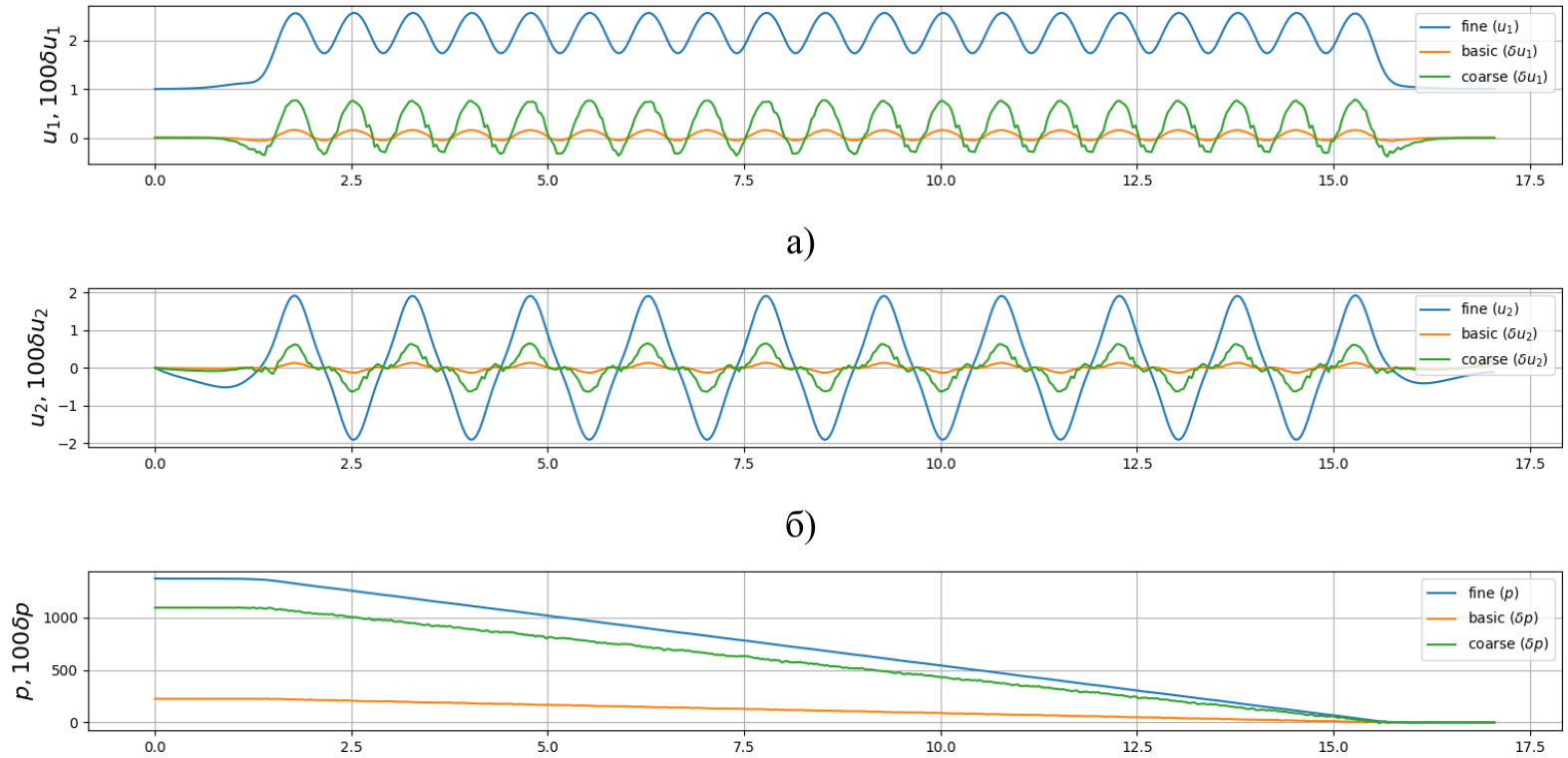


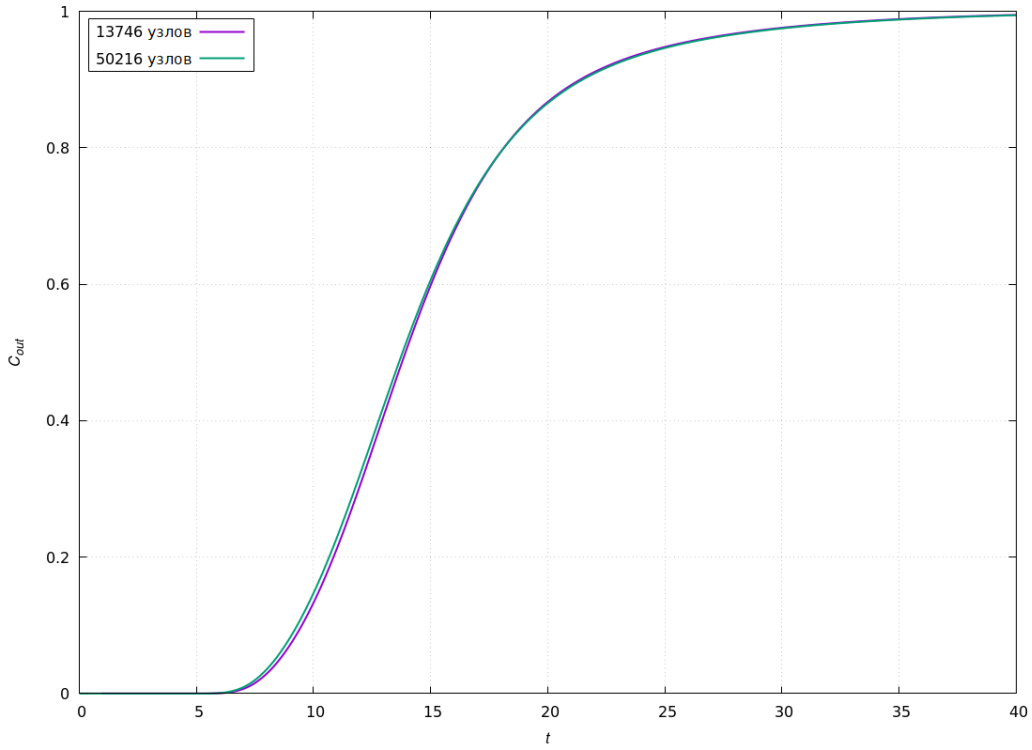
Рисунок 1.8: Компоненты скорости и давления по средней линии расчетной области, рассчитанные на мелкой сетке, а также отличия от решения на более грубых сетках: а) составляющая скорости u_1, б) составляющая скорости u_2, в) давление.

ной концентрации. Обращаем внимание, что сумма депонированной концентрации выражается в $1 - c_{out}(t)$.

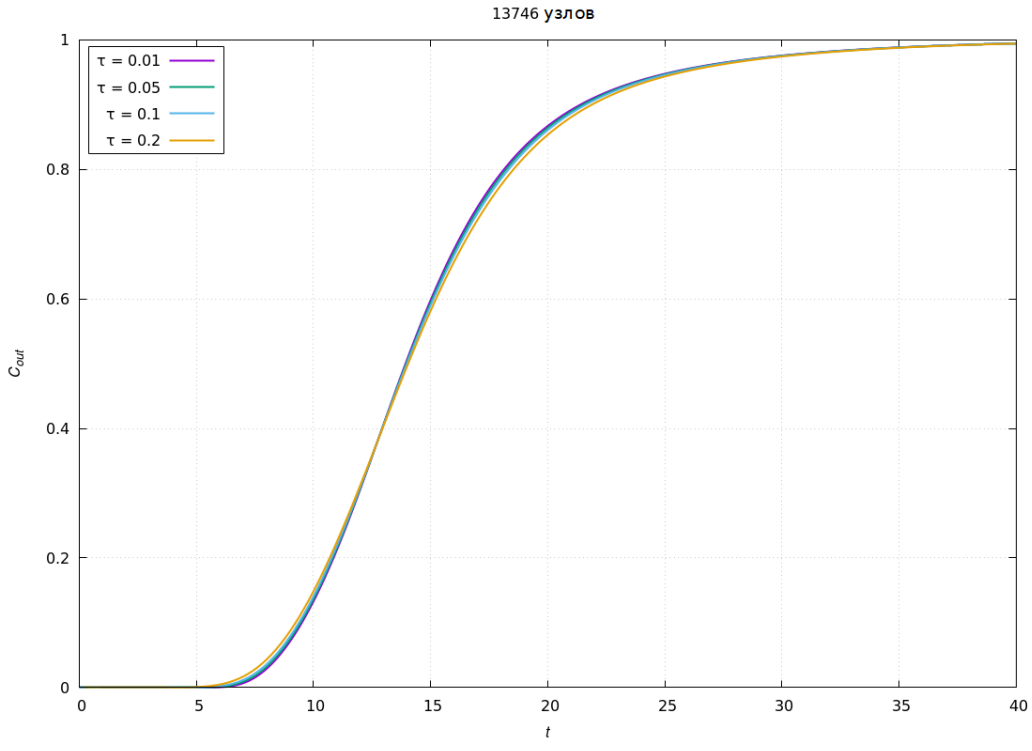
Скорость адсорбции характеризуется Da_a. Влияние этого параметра на концентрацию на выходе показано на Рис. 1.10b. Увеличение Da_a, как и ожидалось, приводит к более интенсивной адсорбции и большему количеству осаждаемого вещества. Влияние параметра Da_d на концентрацию на выходе показано на Рис. 1.10c.

Изотерма Генри обычно хорошо описывает начальные стадии адсорбции. В случаях, когда на поверхности может адсорбироваться только ограниченная масса, следует использовать изотерму Ленгмюра, чтобы отразить спад скорости адсорбции, близкий к насыщению. В этом случае появляется дополнительный параметр, а именно M (см.(1.27)). Влияние M на среднюю выходную концентрацию показано на Рис. 1.10d.

Проведены также исследования для случая доминирующей реакции, к этому случаю мы вернемся чуть позже при исследовании эвристического метода идентификации параметров. Для этого случая, наши параметры будут следующими: $\mathrm{Pe} = 10, M = 1000, \mathrm{Da}_a = 100, \mathrm{Da}_d = 1$. Шаг по времени $\tau = 15$, сетка будет иметь 4760 узлов.

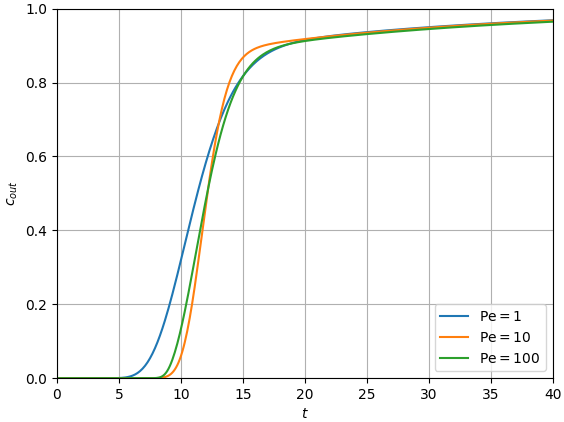


а)

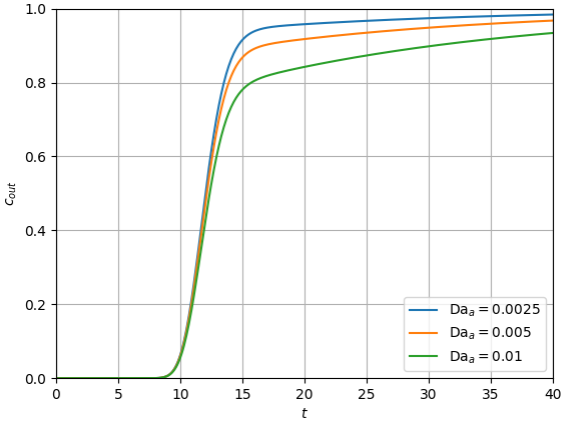


б)

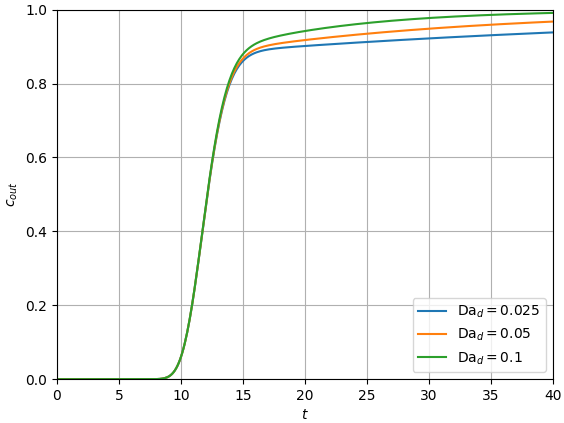
Рисунок 1.9: Концентрация на выходе: а) результаты на серии сеток, б) результаты на разных шагах по времени.



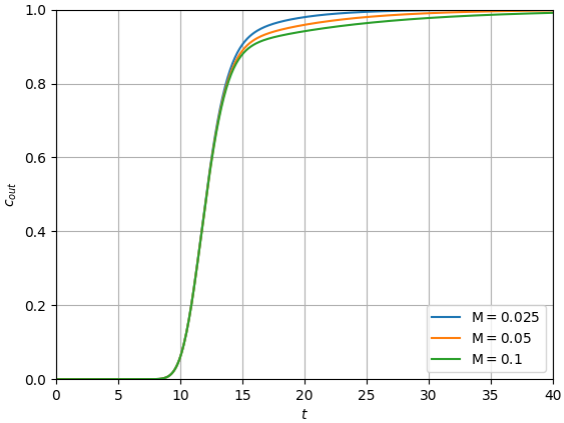
а)



б)



в)



г)

Рисунок 1.10: Концентрация на выходе: а) зависимость от Pe, б) зависимость от Da_a, в) зависимость от Da_d, г) зависимость от M.

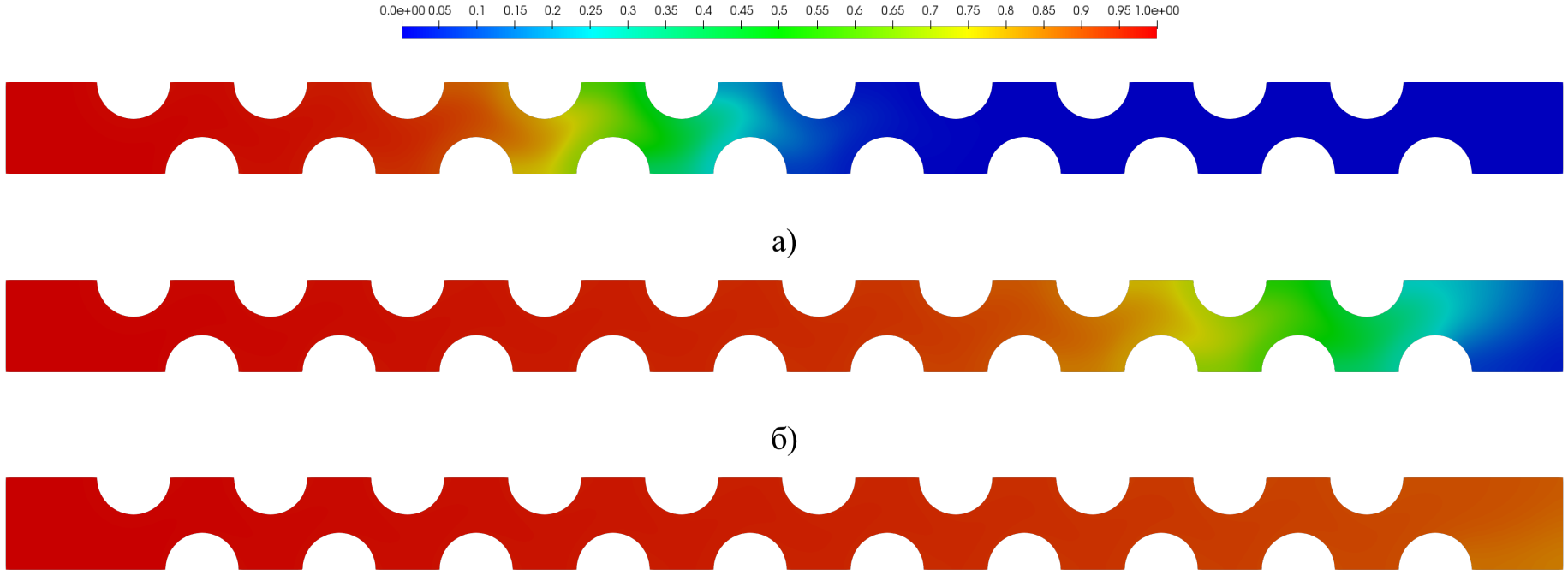


Рисунок 1.11: Концентрация c в разные моменты времени: а) $t = 5$, б) $t = 10$, в) $t = 15$.

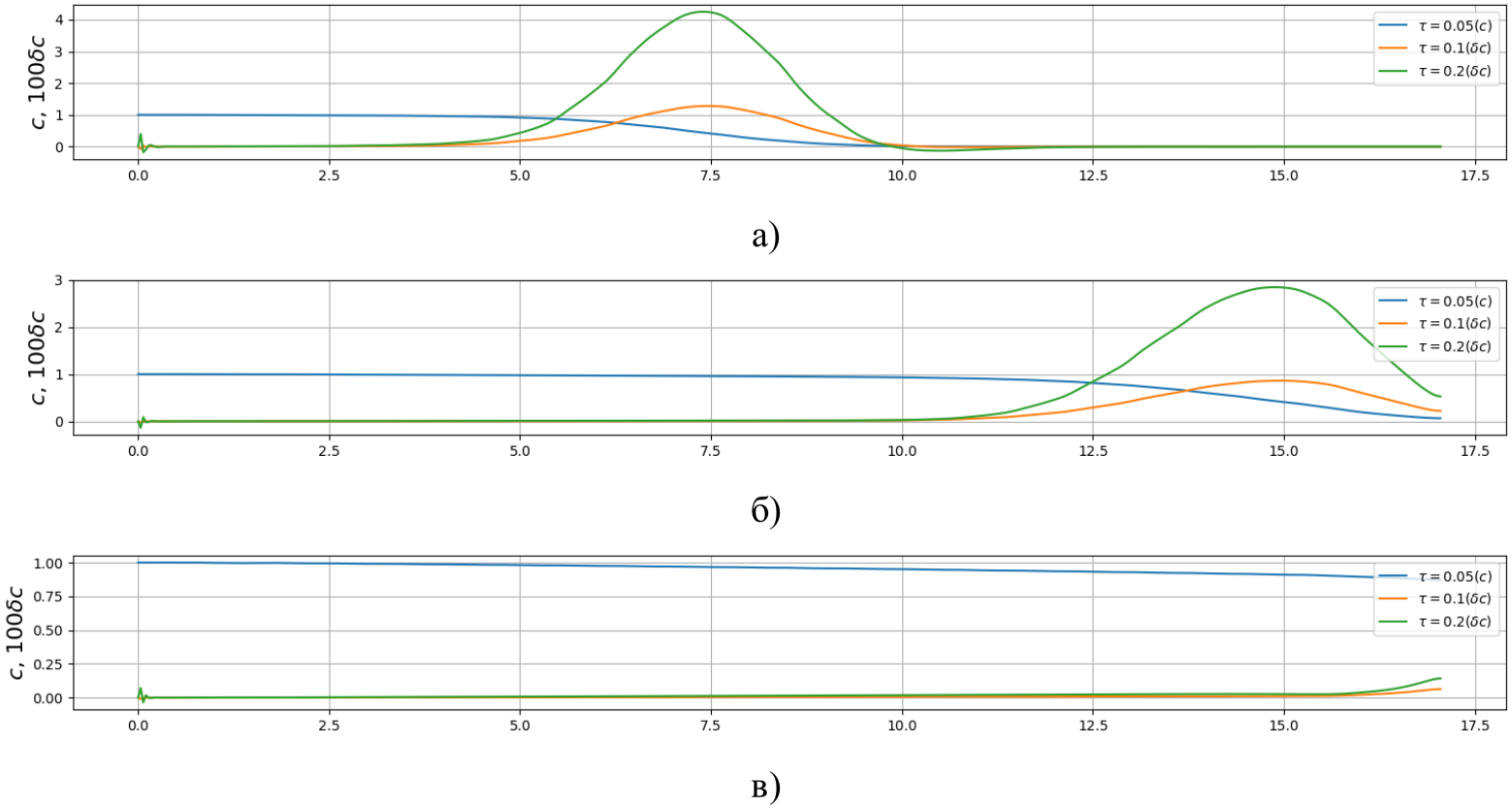
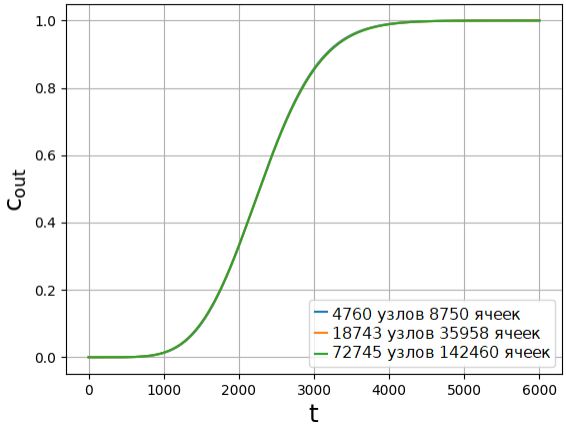
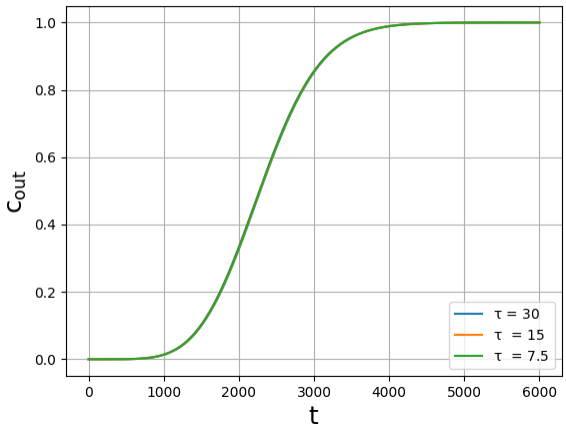


Рисунок 1.12: Концентрация c вычисленная с $\tau = 0.05$ и его отличие δc из концентраций, рассчитанных с помощью $\tau = 0.1$ и $\tau = 0.2$ в разные моменты времени: а) $t = 5$, б) $t = 10$, в) $t = 15$.

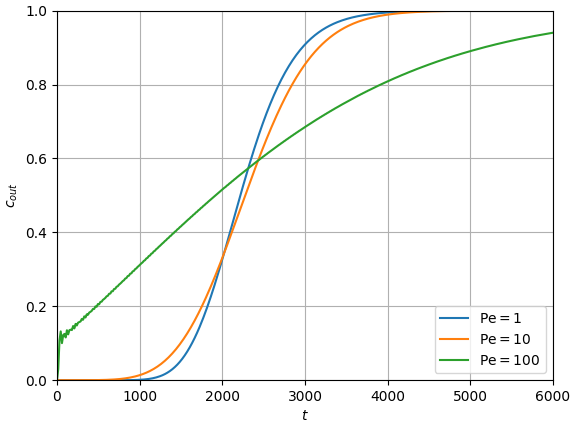


а)

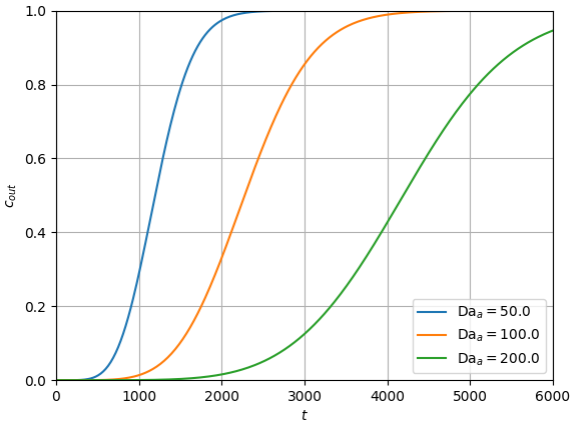


б)

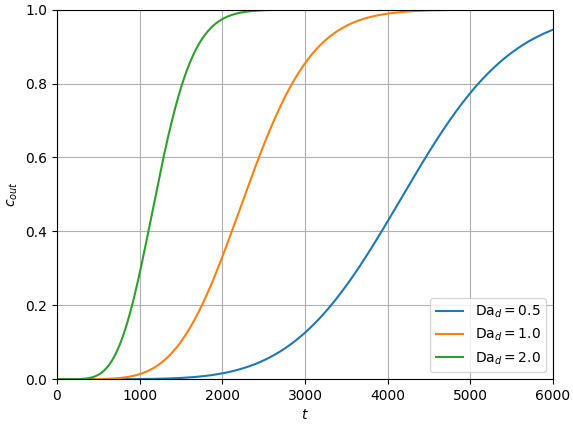
Рисунок 1.13: Концентрация на выходе для случая доминирующей реакции: а) результаты на серии сеток, б) результаты на разных шагах по времени.



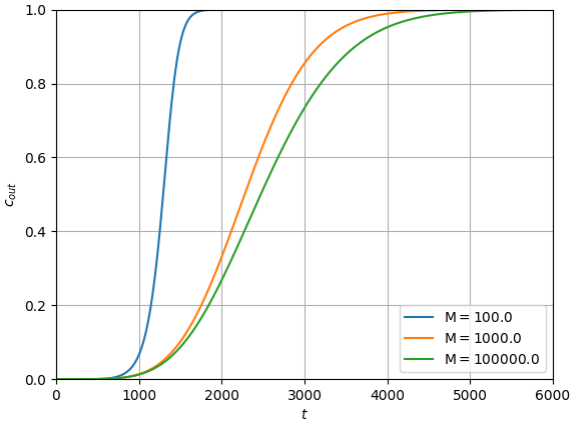
а)



б)



в)



г)

Рисунок 1.14: Концентрация на выходе для случая доминирующей реакции: а) зависимость от Pe, б) зависимость от Da_a, в) зависимость от Da_d, г) зависимость от M.

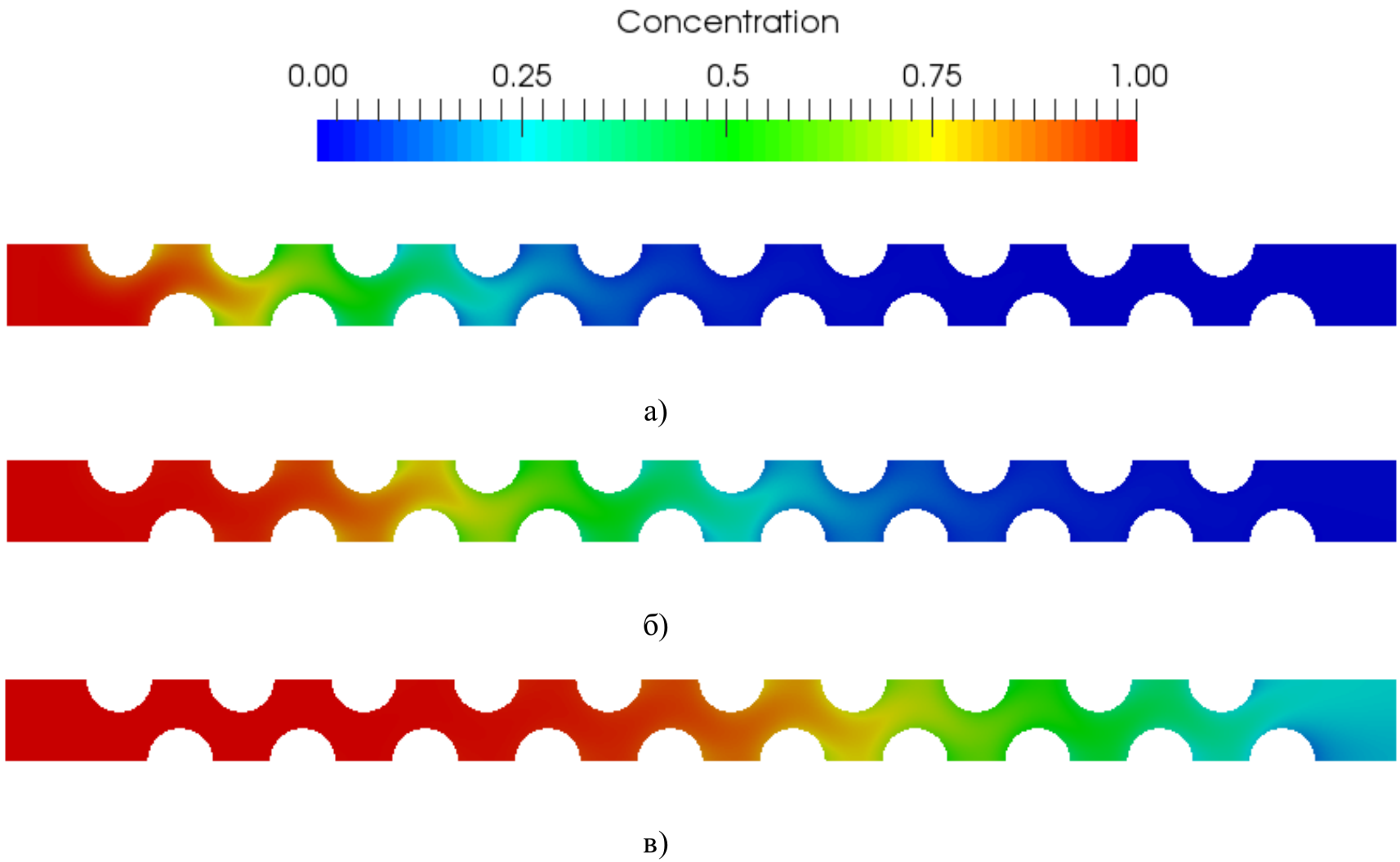


Рисунок 1.15: Концентрация c в разные моменты времени: а) $t = 450$, б) $t = 900$, в) $t = 1800$.

1.6 Выводы

Двумерная математическая модель прямой задачи включает стационарные уравнения Стокса и уравнение конвекции-диффузии, дополненное граничным условием третьего рода, учитывающим процессы адсорбции и десорбции. Рассмотрены изотермы Генри и Ленгмюра, которые описывают кинетику реакции. Прямая задача рассмотрена на идеализированной геометрии масштаба пор, описываемая периодическим расположением полуцилиндрических препятствий. Указаны основные безразмерные параметры. Подход применим для широкого диапазона микрогеометрий и параметров реагирующего массопереноса. Массоперенос моделируется для заданного поля скоростей (односторонняя связь). Численное решение основано на МКЭ с лагранжевыми элементами. При дискретизации по времени используется схема Кранка-Николсон. Проведены исследования влияния дискретизаций по времени и по пространству. Исследования чувствительности проводятся для изучения влияния различных параметров на реагирующий поток через пористую среду.

Глава 2

Детерминированные и стохастические методы идентификации параметров адсорбции и десорбции

В этой главе рассмотрена обратная задача определения неизвестной скорости адсорбции и десорбции (так называемая задача идентификации параметров), используя информацию о динамике средней выходной концентрации. Решение обратной задачи состоит в минимизации функционала невязки между измеренными и вычисленными данными. Отправной точкой является отслеживание невязки для двух параметров в изотерме Генри. Рассмотрен детерминированный подход, когда пространство параметров дискретизируется равномерной сеткой и для каждой пары параметров вычисляется значение невязки. Способ является простейшим, но в то же время является весьма дорогостоящим подходом. Рассмотрен стохастический подход в виде чистого случайного поиска и статистический подход с использованием выборки квазислучайных последовательностей Соболя из пространства искомых параметров. Проведена процедура Монте-Карло для исследования неопределенностей исходящих из стохастики в шуме. В рассматриваемом нами классе задач важно определять не отдельные параметры, а определить именно допустимую область параметров. Это особенно актуально в случае зашумленных экспериментальных данных. Для всех рассматриваемых подходов исследовано влияние шума в экспериментальных данных на процедуру идентификации допустимых наборов параметров, где допустимый набор параметров определяется через установленный порог. Сам порог определяется с помощью априорной оценки функционала невязки с учетом дисперсии равномерно распределенной случайной величины шума в экспериментальных данных. Определение допустимого набора параметров удовлетворяет целям промышленности, где необходимо определять параметры

с точностью порядка шума [22, 128].

2.1 Детерминированный подход

Рассмотрим задачу идентификации скоростей адсорбции (Da_a) и десорбции (Da_d) на изотерме Генри используя данные результатов измерений $\widetilde{c}_{out}(t)$. Функционал невязки определяется выражением:

$$J(\mathrm{Da}_a, \mathrm{Da}_d) = \int_0^T (c_{out}(t) - \widetilde{c}(t))^2 dt, \tag{2.1}$$

где $c_{out}(t)$ задан (1.32) после решения уравнений Стокса (1.16)–(1.21) вместе с соответствующими граничными условиями и после решения (1.22)–(1.25). Мы используем синтетический подход для имитации данных измерений. На предварительном этапе решается прямая задача для выбранных фиксированных значений ($\widetilde{\mathrm{Da}}_a,\ \widetilde{\mathrm{Da}}_d$), которые мы будем называть точным решением процедуры идентификации, или точными параметрами. Такими параметрами были выбраны $(0.005, 0.05)$. Вычисленный $c_{out}(t)$ используется в качестве данных измерений в случае отсутствия шума, т.е. в этом случае $\widetilde{c}(t) = c_{out}(t)$.

Это относительно простая задача идентификации параметров, т.к необходимо идентифицировать только два параметра. С учетом того, что прямая задача может быть быстро и эффективно решена численно, здесь будет рассмотрена простая стратегия идентификации параметров. Рассмотрим начальный допустимый набор G установленный как

$$0 \leq \mathrm{Da}_a \leq 0.01, \quad 0 \leq \mathrm{Da}_d \leq 0.1.$$

Расчеты проводятся на равномерной сетке для параметров $\mathrm{Da}_a,\ \mathrm{Da}_d$ с 50×50 узлами: прямая задача решается для каждой пары параметров из этой сетки. Здесь и ниже изолинии визуализируются с помощью библиотеки *matplotlib* [138]. Изолинии функционала строятся с шагом 0.02. В этом случае минимум функционала равен нулю, $\min J(\mathrm{Da}_a, \mathrm{Da}_d) = 0$, и это достигается в точке

$(0.005, 0.05)$. Напомним, что эта точка использовалась для имитации путем вычислений данных измерений. В данном конкретном случае эта точка принадлежит сетке параметров, на которой мы ищем решение. Визуализация функционала невязки показана на Рис. 2.1.

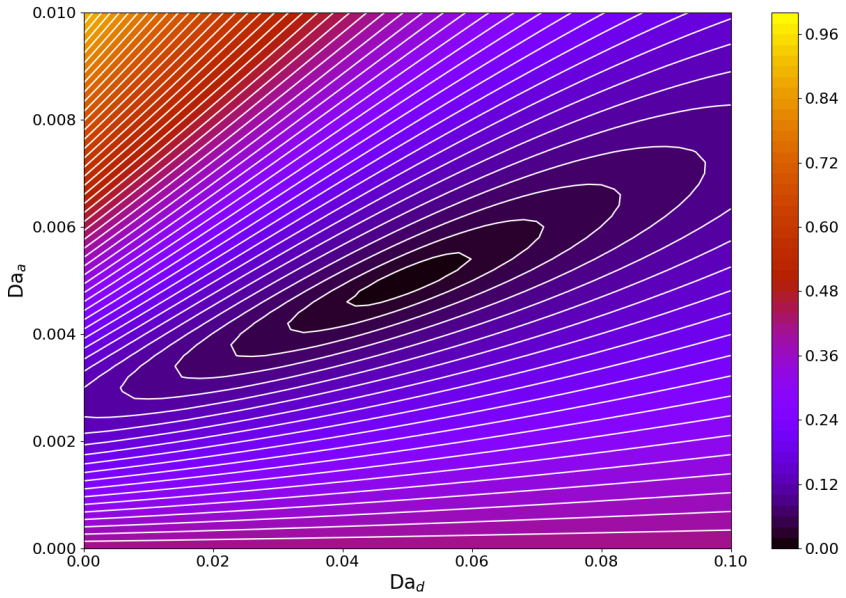


Рисунок 2.1: Функционал невязки при точных данных ($\delta = 0$).

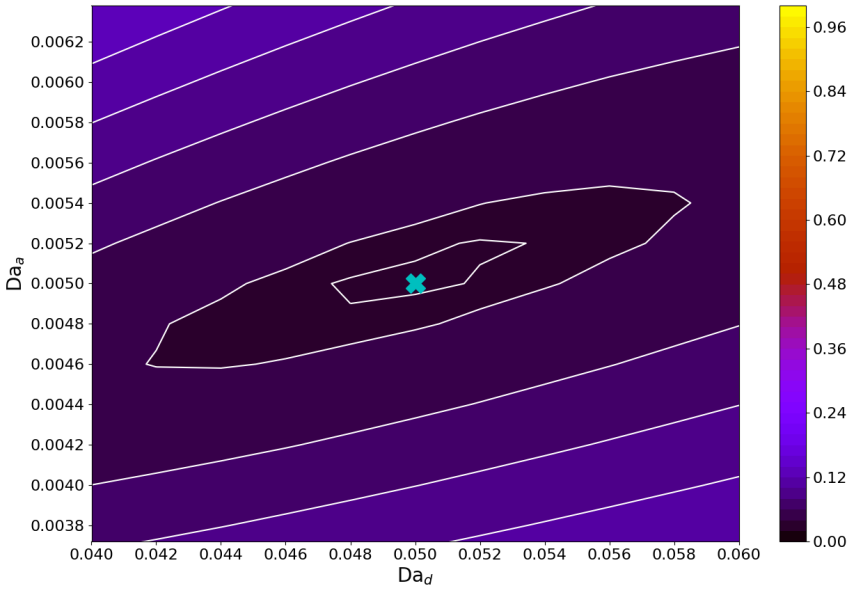


Рисунок 2.2: Функционал невязки при $\delta = 0.01$.

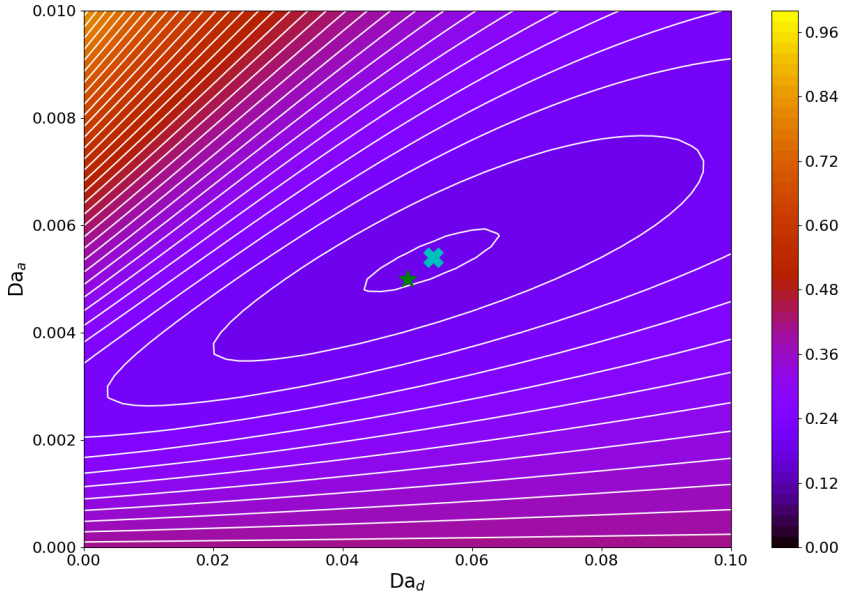


Рисунок 2.3: Функционал невязки при $\delta = 0.05$.

2.2 Влияние шума в экспериментальных данных

В действительности данные измерений часто зашумлены, поэтому важно понимать, как шум влияет на идентификацию параметров. Предположим, что измерения проводятся на каждом временном шаге. Вместо (1.32), давайте рассмотрим зашумленное измерение:

$$\widetilde{c}(t^n) = c_{out}(t^n; \widetilde{\mathrm{Da}}_a, \widetilde{\mathrm{Da}}_d) + \delta\sigma(t^n), \quad n = 1, 2, ..., N, \quad N\tau = T.$$

Здесь параметр δ определяет амплитуду шума, а $\sigma(t^n)$ — случайная величина, равномерно распределенная на интервале $[-1, 1]$.

В случае зашумленных данных измерений, вместо попытки идентифицировать одну точку в пространстве параметров (что является наиболее часто рассматриваемым случаем в задачах идентификации параметров) следует идентифицировать набор в пространстве параметров, для которого значение невязки функционала ниже установленного порога. Учитывая дисперсию равномерно распределенной случайной величины σ, определим множество допустимых параметров следующим неравенством:

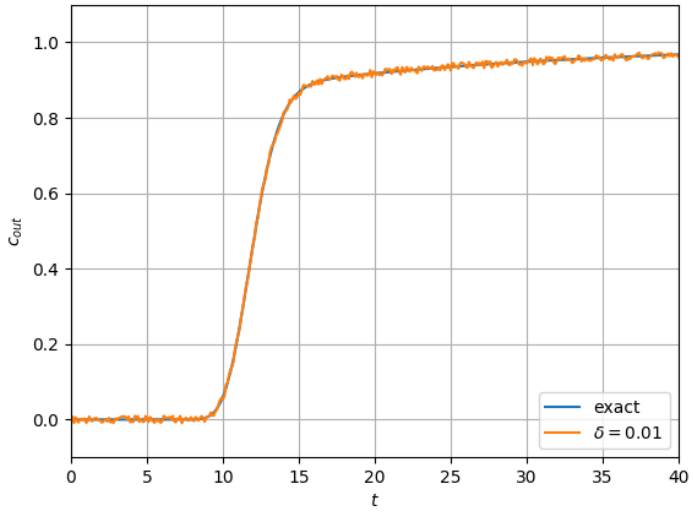
$$J(\mathrm{Da}_a, \mathrm{Da}_d) \leq \gamma\delta^2\frac{T}{3}, \tag{2.2}$$

где $\gamma > 1$ числовой параметр.

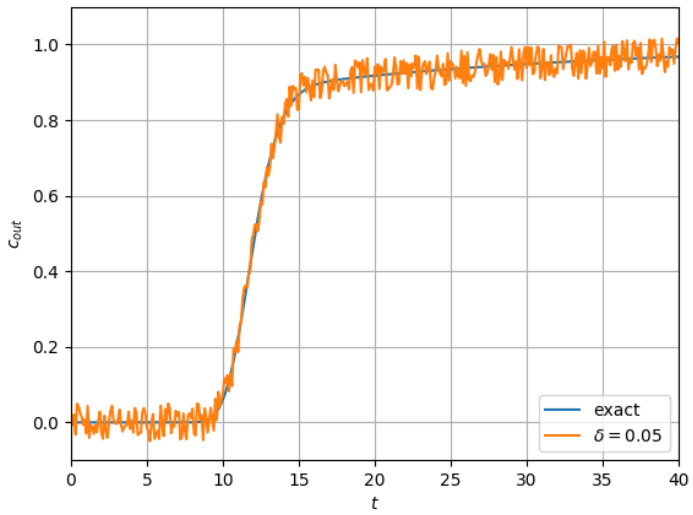
В приведенной выше априорной оценке определение допустимого множества явно зависит от временного интервала, в течение которого производятся измерения. Очевидно, что может быть разумным игнорировать данные измерений до прорыва, а также игнорировать данные измерений после достижения равновесия. Вопрос о минимально необходимой информации для процедуры идентификации и с каким интервалом времени целесообразно работать, здесь обсуждатся не будет. Мы будем рассматривать относительно большой временной интервал измерений (см. Рис. 2.4).

Одна реализация зашумленных данных для средней концентрации на выходе показана на Рис. 2.4a для случая $\delta = 0.01$. Квадратный корень из остаточного функционала для этого случая отображается цветом на Рис. 2.2, также нанесены некоторые изолинии. В этом случае из-за шума минимум функционала не равен нулю, он равен 0.0361. Точка минимума функционала отмечена значком $\times$, точные параметры отмечены $\star$ на самом рисунке. Первая построенная изолиния для функционала невязки J, вычисляется из (2.2) для $\gamma = 1.02625$.

Аналогичные результаты для значительно более высокой амплитуды шума, ($\delta = 0.05$, Рис. 2.4b) показаны на Рис. 2.3. В этом случае минимум функционала равен 0.1840. Первая построенная изолиния для невязки J также рассчитывается с $\gamma = 1.02625$. Мы видим, что минимум функционала в этом случае достигается в точке, которая относительно далека от точного значения, что указывает на то, что одного измерения может быть недостаточно для точной идентификации параметров в случае очень зашумленных данных.



а)



б)

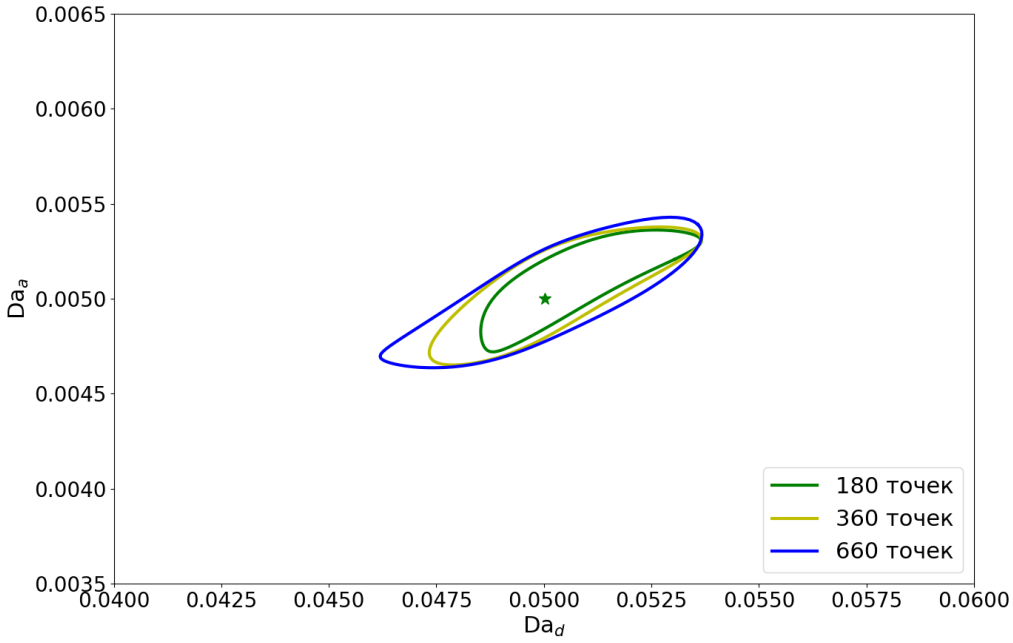
Рисунок 2.4: Средняя концентрация на выходе: а) $\delta = 0.01$, б) $\delta = 0.05$.

2.3 Стохастическая идентификация параметров

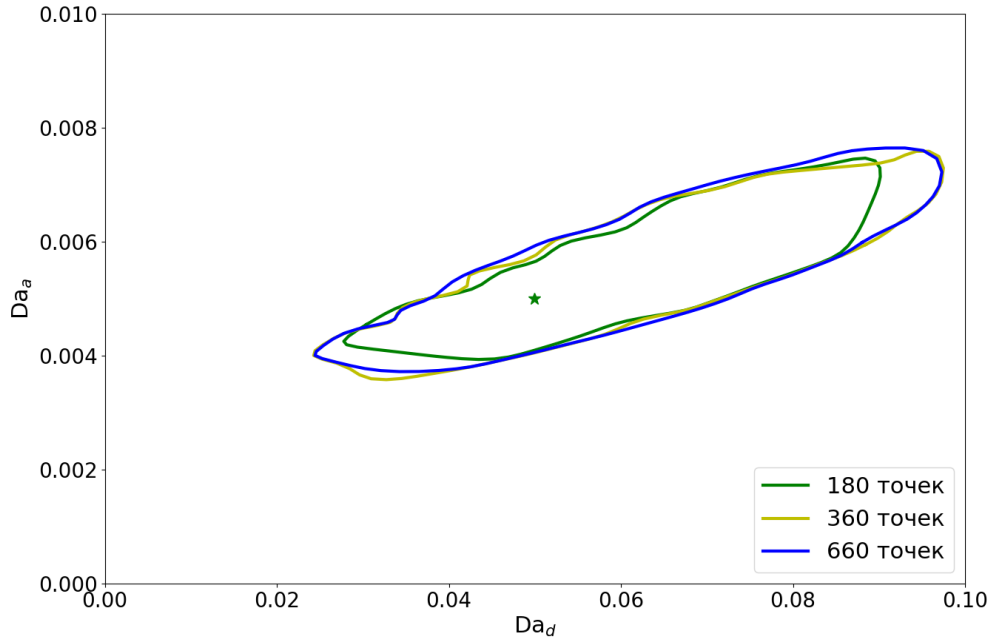
Задача определения параметров адсорбции в этом случае формулируется следующим образом. Найти результирующее (окончательное) допустимое множество $\mathrm{Da}_a, \mathrm{Da}_d$, удовлетворяющее (2.2), из начального набора допустимых параметров G. Эту проблему можно решить с помощью различных подходов локальной и в общем случае глобальной оптимизации [102, 103].

Напомним, что стандартный подход к решению задач идентификации параметров для уравнений в частных производных [85, 139] не нацелен на определение допустимого набора параметров, вместо этого он нацелен на определение конкретной точки в пространстве параметров. Обычно в составе таких подходов используются градиентные методы. Оценка допустимого набора параметров для таких детерминированных подходов может быть основана на итеративной минимизации функционала невязки, начиная с разных начальных значений. Такой подход называется мультистарт методом.

В качестве альтернативы мы рассматриваем здесь стохастические методы и их варианты, основанные на детерминированной выборке точек. Стохастический подход к глобальной оптимизации в простейшем виде состоит только из случайного поиска и называется чистым случайным поиском [104]. В этом случае функционал невязки оценивается в случайно выбранных точках, принадлежащих допустимому (начальному) набору параметров. Такой стохастический подход более эффективен, чем вычисление функции невязки на равномерной сетке в допустимом множестве (см. Рис. 2.5).



a)



b)

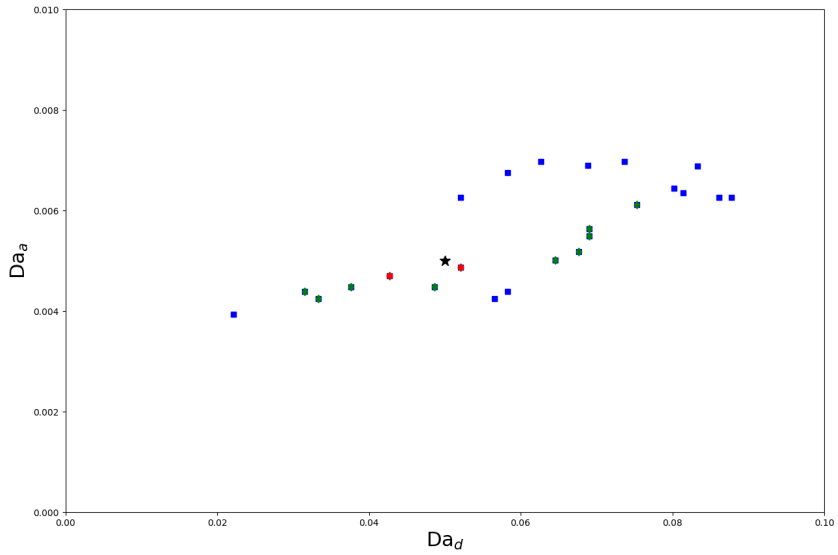
Рисунок 2.5: Функционал невязки : a) шум с амплитудой $\delta = 0.01$, b) шум с амплитудой $\delta = 0.05$.

Рассмотрим случай, когда начальное допустимое множество G определяется простым способом:

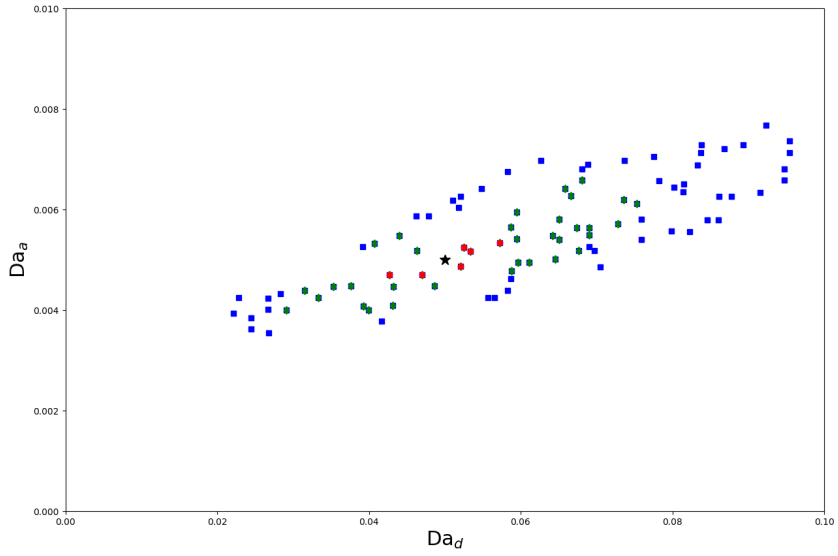
$$0 \leq \mathrm{Da}_a \leq \overline{\mathrm{Da}}_a, \quad 0 \leq \mathrm{Da}_d \leq \overline{\mathrm{Da}}_d.$$

Для генерации равномерно распределенных точек D из G используются последовательности Соболя [105, 106]. Программная реализация основана на библиотеке анализа чувствительности SALib [140]. Такой подход широко используется в прикладных задачах многопараметрической идентификации (см., например, [107]). Результат статистической идентификации для $N = 150$ точек показаны на Рис. 2.6а. Аналогичные результаты для $N = 600$ точек показаны на Рис. 2.6б. В обоих случаях мы строим точки из случайного набора, для которых значение невязки удовлетворяет (2.2) с $\gamma = 1.02625$.

Видно, что для небольшого количества точек выборки трудно восстановить разумный окончательный допустимый набор, потому что только несколько точек удовлетворяют (2.2). Для большей амплитуды шума доступно больше точек из-за сглаживания функционала, но в то же время точность в этом случае хуже.



а)



б)

Рисунок 2.6: Детерминированная выборка точек, график точек, для которых выполняется неравенство (2.2) ($\delta = 0.01$ — красный, 0.03 — зеленый, 0.05 — синий): а) $N = 150$, б) $N = 600$.

2.4 Многоступенчатая идентификация параметров

В рассматриваемом здесь случае, когда нужно идентифицировать только два параметра и мы имеем дело с выпуклым функционалом, можно рассматривать многоступенчатую идентификацию параметра. Вместо увеличения количества выборок можно рассмотреть многоступенчатый метод, который подразумевает последовательное сокращение начального допустимого набора. Например, (см. Рис. 2.1) результаты полученные для $N = 150$ выборки исходного начального допустимого набора G

$$0 \leq \mathrm{Da}_a \leq 0.01, \quad 0 \leq \mathrm{Da}_d \leq 0.1,$$

могут быть использованы для оценки нового возможного набора. Этот набор может стать стартовым для второго этапа процедуры идентификации, например:

$$0.002 \leq \mathrm{Da}_a \leq 0.009, \quad 0.03 \leq \mathrm{Da}_d \leq 0.07.$$

Моделирование в уменьшенной области на втором этапе процедуры идентификации дает хорошую точность определения окончательного допустимого набора, см. Рис. 2.7.

Дополнительной особенностью рассматриваемой здесь задачи является то, что разные параметры адсорбции по-разному влияют на раствор в разные промежутки времени. Например, результаты на Рис. 1.10 показывают, что динамика концентрации вытекающего потока различается на подинтервалах слева и справа от $T = 15$. Эта особенность делает разумным рассмотрение функционала невязки (2.1) на меньшем временном интервале, а именно до $T = 15$. На Рис. 2.8 показано допустимое множество, рассчитанное при разной амплитуде шума в этом случае. Сравнение с моделированием, выполненным $(0, T)$ для $T = 40$ (см. Рис. 2.6а), показывает, что с относительно небольшим количеством выборок мы идентифицировали один из двух параметров (Da_a в дан-

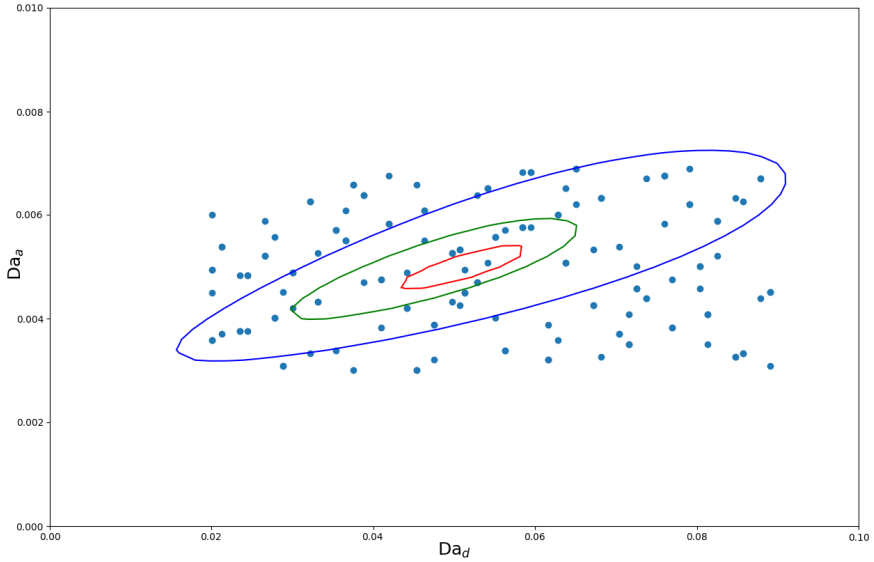


Рисунок 2.7: Сжатая область допустимых параметров для $N = 150$: $\delta = 0.01$ — красного, $\delta = 0.03$ — зеленого, $\delta = 0.05$ — синего.

ном случае) с приемлемой точностью. Мы можем использовать это как отправную точку для следующего этапа, учитывая меньший набор G, (для которого $0.03 \leq \mathrm{Da}_d \leq 0.06$).

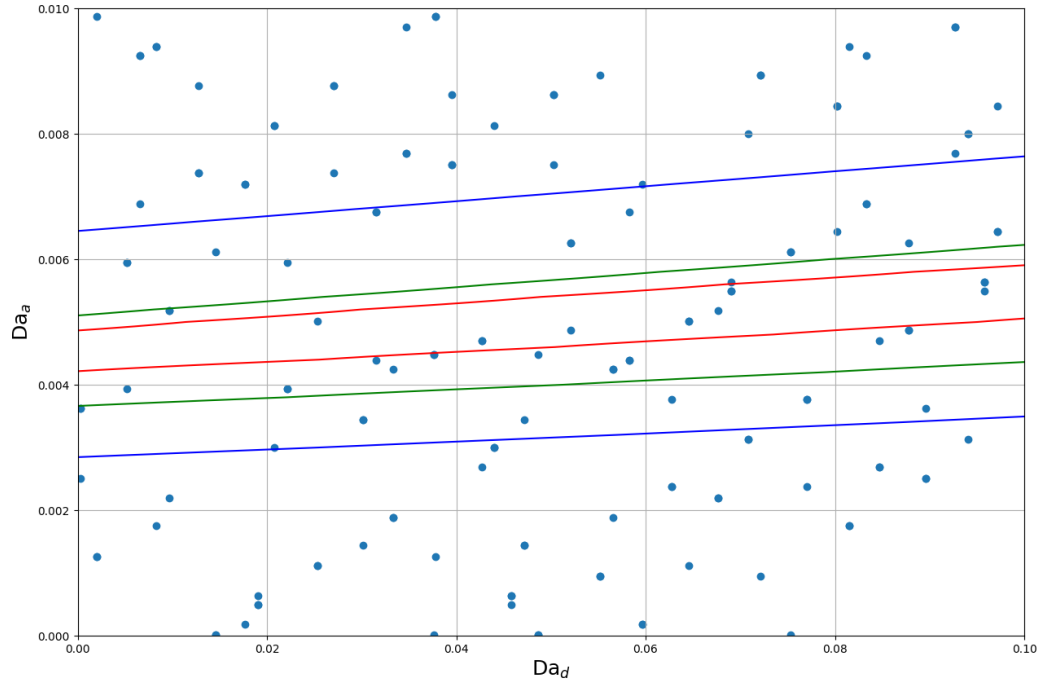


Рисунок 2.8: Сжатая область допустимых параметров для $N = 150$: $\delta = 0.01$ — красного, $\delta = 0.03$ — зеленого, $\delta = 0.05$ — синего.

2.5 Метод Монте-Карло

Чтобы исследовать роль стохастичности в шуме, моделирование с десятью различными реализациями шума выполняется для каждого из уровней шума $\delta = 0.01$ и $\delta = 0.05$. Приведенные допустимые множества показаны на Рис. 2.9 и Рис. 2.10. Для лучшей наглядности, для каждой реализации нанесено по одной изолинии, и была выбрана относительно большое значение $\gamma = 1.21$ для изолиний, во избежание выделений локальных экстремумов, которые могут появиться из-за сильно зашумленных данных. Точки, в которых достигаются минимумы функционала, близки к точной точке при $\delta = 0.01$ и поэтому не отображаются. При $\delta = 0.05$ они обозначены на рисунке знаком $\times$. Область перекрытия сокращается, указывая на то, что точность идентификации параметра может быть улучшена путем выполнения ряда имитаций для различных реализаций шума. Следует отметить, что в [141] авторы исследовали роль за-

шумленных данных в связи с другой проблемой идентификации параметров. Они доказали, что при определенных условиях шума (которые выполняются также в нашем случае) в рамках процедуры Монте-Карло (работа с достаточно большим набором данных измерений) могут быть идентифицированы точные параметры. Однако в случае большой дисперсии может потребоваться очень большое количество измерений. Такой подход важен в том случае, когда параметры необходимо идентифицировать с высокой точностью. Однако во многих промышленных задачах целью является определение параметров с точностью порядка шума.

Следует отметить, что не допускается, что вычисленные окончательные допустимые множества для двух различных реализаций шума будут перекрываться. Если это будет иметь место с некоторыми из вычисленных окончательных допустимых множеств, необходимо выбрать подмножество перекрывающихся допустимых множеств, чтобы выбрать сокращенную область.

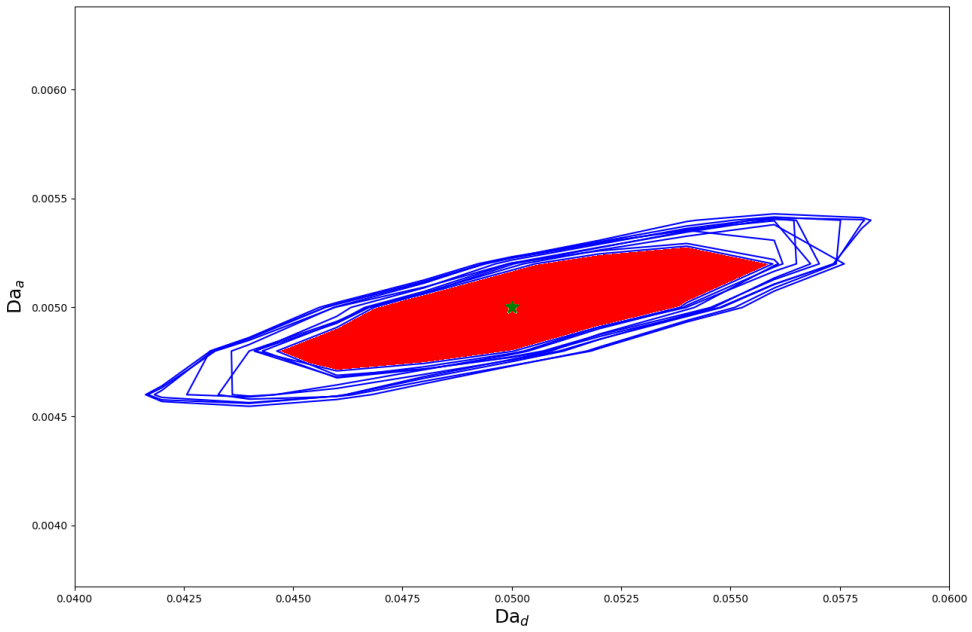


Рисунок 2.9: Допустимый набор параметров адсорбции для десяти реализаций по амплитуде шума $\delta = 0.01$.

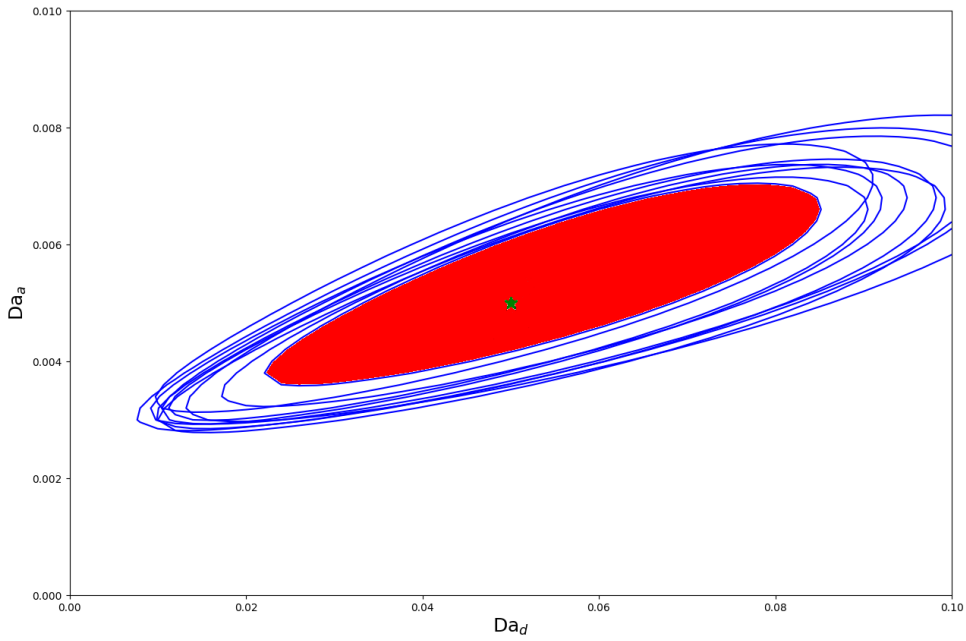


Рисунок 2.10: Допустимый набор параметров адсорбции для десяти реализаций по амплитуде шума $\delta = 0.05$.

2.6 Выводы

Детерминированные и стохастические, одноступенчатые и многоступенчатые алгоритмы для идентификации неизвестных скоростей адсорбции и десорбции на изотерме Генри представлены в сочетании с моделированием реакционного потока в масштабе пор. Кривые проскока играют роль дополнительных данных, необходимые для решения задачи идентификации параметров. Учитываются точные и зашумленные данные. В последнем случае обсуждается их влияние на процедуру идентификации. Следует отметить, что в реальной задаче невозможно идентифицировать единичные значения параметров поиска, вместо этого идентифицируются допустимые наборы параметров. Показана роль стохастичности в шуме, путем проведения процедуры Монте-Карло на 10 разных реализациях шума. В конце процедуры можно прийти к естественному выводу, что чем больше экспериментальных данных, тем меньше будет область допустимых значений.

Глава 3

Байесовский подход в идентификации параметров адсорбции и десорбции

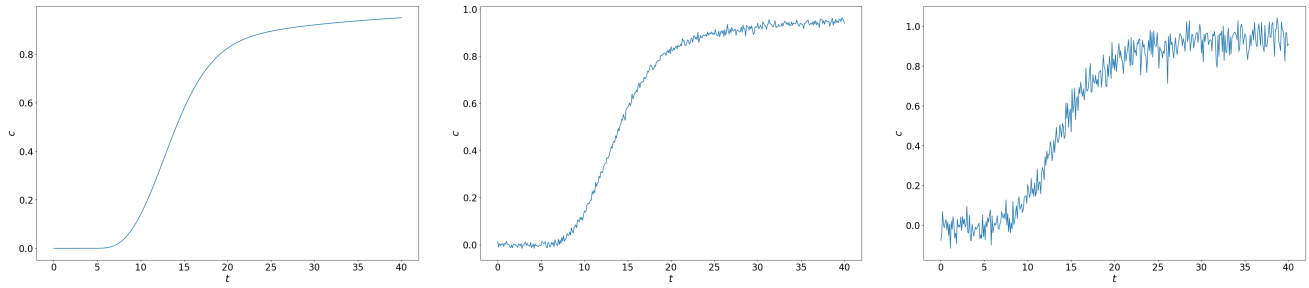
В этой главе рассмотрен Байесовский подход в оценке параметров адсорбции и десорбции с количественной оценкой неопределенности. Выборка апостериорного распределения получена методом Монте-Карло на цепи Маркова. Реализованы два алгоритма для построения выборки: Метрополис-Гастингс (Metropolis-Hastings, MH) и Адаптивный Метрополис (Adaptive Metropolis, AM). Рассмотрено влияние шума с разной дисперсией на процедуру идентификации. Проведены сравнения между двумя алгоритмами через функцию автокорреляции. Область допустимых значений определяется через доверительный интервал для обоих алгоритмов. Исследовано влияние количества экспериментальных данных для уточнения области допустимых значений. Выполнен анализ выборки с использованием автокорреляционной функции, также проведен анализ скорости приема алгоритма для оценки смешения цепи Маркова. Установлено, что выборка MCMC (Markov chain Monte-Carlo) достаточно хороша для определения допустимого набора параметров через доверительный интервал для обоих алгоритмов, однако, предпочтительнее Адаптивный Метрополис, поскольку в нем нет необходимости в "настройках"алгоритма [129].

3.1 Байесовский подход

Для обратной задачи мы попытаемся определить скорости адсорбции и десорбции на основе синтетических экспериментальных измерений $\boldsymbol{d}$, которые определяются как:

$$\boldsymbol{d} = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{\theta}) + \boldsymbol{\varepsilon}, \tag{3.1}$$

где $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{\theta})$ — кривая прорыва (1.32) из прямой задачи описанной в предыдущем разделе с заданным вектором параметров $\boldsymbol{\theta} = \{\mathrm{Da}_a, \mathrm{Da}_d\}$, $\boldsymbol{\varepsilon}$ — аддитивный шум имеющий гауссово распределение $\mathcal{N}(0, \sigma^2)$ с нулевым средним и дисперсией σ^2. Этот вид шума также известен как «белый шум» [142]. Синтетические экспериментальные измерения с разной дисперсией шума можно видеть на рисунках 3.1б и 3.1в.



а) б) в)

Рисунок 3.1: Кривые прорыва синтетических экспериментальных измерений: а) без шума, б) со случайным шумом с дисперсией $\sigma^2 = 0.01$, в) со случайным шумом с дисперсией $\sigma^2 = 0.05$.

Байесовская формулировка ставит задачу оценки параметров как задачу статистического вывода по пространству параметров. Решением полученной байесовской обратной задачи является апостериорная функция плотности вероятности (Posterior Density Function, PDF) [93, 108, 109, 143]. Теорема Байеса явно устанавливает апостериорную PDF как

$$\rho(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{d}) \propto \rho(\boldsymbol{d}|\boldsymbol{\theta})\rho(\boldsymbol{\theta}), \tag{3.2}$$

где $\rho(\boldsymbol{d}|\boldsymbol{\theta})$ — функция правдоподобия, $\rho(\boldsymbol{\theta})$ — априорные знания о параметрах.

Если предполагается, что дисперсия шума известна и шум $\boldsymbol{\varepsilon}$ не зависит от $\boldsymbol{\theta}$, то функция правдоподобия принимает простую мультигауссовскую форму

$$\rho(\boldsymbol{d}|\boldsymbol{\theta}) = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{N/2}} \prod_{i=1}^{N} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2} \parallel \boldsymbol{d}_i - \boldsymbol{f}(\boldsymbol{\theta}) \parallel^2\right), \tag{3.3}$$

где N — количество измерений.

Хотя бы некоторая информация об идентифицируемых параметрах должна быть известна заранее. Например положительность или диапазон на основе рассматриваемой физической задачи и т. д. Для ситуации с очень ограниченной информацией лучше всего выбрать равномерное априорное распределение. Он означает, что любой параметр в диапазоне [0, 0.01] для Da_a и [0, 0.1] для Da_d с одинаковой вероятностью будет искомым параметром. В некоторой литературе это априорное распределение называется неинформативным априорным или плоским априорным распределением, то есть $\rho(\boldsymbol{\theta}) \propto 1$ в интересующей области. В этом случае наша апостериорная оценка будет пропорциональна нашему распределению функции правдоподобия.

$$\rho(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{d}) \propto \rho(\boldsymbol{d}|\boldsymbol{\theta}). \tag{3.4}$$

3.2 Метод Монте-Карло на цепях Маркова

Метод Монте-Карло на цепи Маркова (Markov chain Monte-Carlo, MCMC) — это метод выборки с помощью компьютера [144, 145]. Он позволяет охарактеризовать распределение не зная всех математических свойств распределения, путем случайной выборки значений из этого распределения. Особая сила MCMC заключается в том, что его можно использовать для извлечения выборок из распределений, даже если все что известно о распределении это то, как рассчитать плотность для различных выборок. Название MCMC сочетает в себе два свойства: Монте-Карло и цепь Маркова. Монте-Карло — это практика оценки свойств распределения путем изучения случайных выборок из распределения. Например, вместо нахождения среднего значения нормального распределения путем прямого вычисления его из уравнений распределения, подход Монте-Карло заключался бы в том, чтобы извлечь большое количество случайных выборок из нормального распределения и вычислить их среднее значение. Преимущество подхода Монте-Карло очевидно: вычисление среднего

значения большой выборки чисел может быть намного проще, чем вычисление среднего значения непосредственно из уравнений нормального распределения. Это преимущество наиболее ярко проявляется, когда проще провести случайную выборку и когда с уравнениями распределения трудно работать другими способами. Свойство цепи Маркова МСМС заключается в том, что случайные выборки генерируются с помощью специального последовательного процесса. Каждая случайная выборка используется как ступенька для генерации следующей случайной выборки (отсюда и цепочка). Особое свойство цепочки состоит в том, что каждая новая выборка зависит от предыдущей, но новые выборки не зависят ни от каких выборок перед предыдущей (это свойство «Маркова»). МСМС особенно полезен при байесовском выводе из-за акцента на апостериорных распределениях, с которыми часто трудно работать с помощью аналитического исследования. В этих случаях МСМС позволяет пользователю аппроксимировать аспекты апостериорных распределений, которые нельзя вычислить напрямую (например, случайные выборки из апостериорных распределений, апостериорных средних и т.д.) [114].

3.3 Алгоритм Метрополиса-Гастингса

Наиболее популярным методом МСМС вероятно является алгоритм Метрополиса-Гастинга (Metropolis-Hastings, МН). МН позволяет нам получать выборки из любого распределения вероятностей, $\rho(\boldsymbol{\theta})$, при условии, что мы можем вычислить по крайней мере значение пропорциональное ему. То есть, игнорируя нормализующий коэффициент. Это очень полезно, потому что во многих задачах сложнее всего вычислить нормализующий коэффициент, особенно в больших измерениях.

Алгоритм МН следующий:

1. Выберите начальное значение для параметра, $\boldsymbol{\theta}_i$. Это можно сделать случайным образом или сделав обоснованное предположение.

2. Выберите новое значение параметра, $\boldsymbol{\theta}_{i+1}$, путем выборки из простого для выборки распределения, такого как распределение по Гауссу или равномерное распределение, $q(\boldsymbol{\theta}_{i+1}|\boldsymbol{\theta}_i)$. Мы можем думать об этом шаге как о каком-то возмущении состояния $\boldsymbol{\theta}_i$.
3. Вычислите вероятность принятия нового значения параметра, используя критерий Метрополиса-Гастингса:

$$\rho_a(\boldsymbol{\theta}_{i+1}|\boldsymbol{\theta}_i) = min\left(1, \frac{\rho(\boldsymbol{\theta}_{i+1})q(\boldsymbol{\theta}_i|\boldsymbol{\theta}_{i+1})}{\rho(\boldsymbol{\theta}_i)q(\boldsymbol{\theta}_{i+1}|\boldsymbol{\theta}_i)}\right). \tag{3.5}$$

4. Если вероятность, вычисленная на шаге 3, больше, чем значение, взятое из равномерного распределения на интервале [0, 1], мы принимаем новое состояние; в противном случае мы остаемся в старом состоянии.
5. Мы повторяем с шага 2, пока у нас не будет достаточно образцов.

3.4 Алгоритм адаптивного Метрополиса

Узким местом в расчетах МСМС часто является поиск предложения, которое соответствует целевому распределению, чтобы выборка была эффективной. Это может привести к длительной настройке предложения методом проб и ошибок, что в случае дорогостоящих вычислений может обойтись слишком дорого. Были разработаны различные адаптивные методы для улучшения предложения во время выполнения [146]. Один относительно простой способ — вычислить ковариационную матрицу цепочки и использовать ее в качестве предложения. Этот метод называется алгоритмом Адаптивного Метрополиса [147]. В АМ новая точка зависит не только от предыдущей точки, но и от более ранней истории цепи. Таким образом, алгоритм больше не является марковским.

Адаптивный Метрополис — это алгоритм случайного блуждания, который использует гауссовское предложение с ковариацией, зависящей от сгенерированной на данный момент цепочки,

$$C_n = \begin{cases} C_0, & n \leq n_0, \\ s_d \; cov(\theta_1, ..., \theta_n) + s_d \varepsilon I_d, & n > n_0, \end{cases} \tag{3.6}$$

где s_d — параметр зависящий только от размерности d выборки пространства, $\varepsilon > 0$ — константа, которую мы можем выбрать очень маленькой, и $n_0 > 0$ определяет продолжительность начального периода без адаптации.

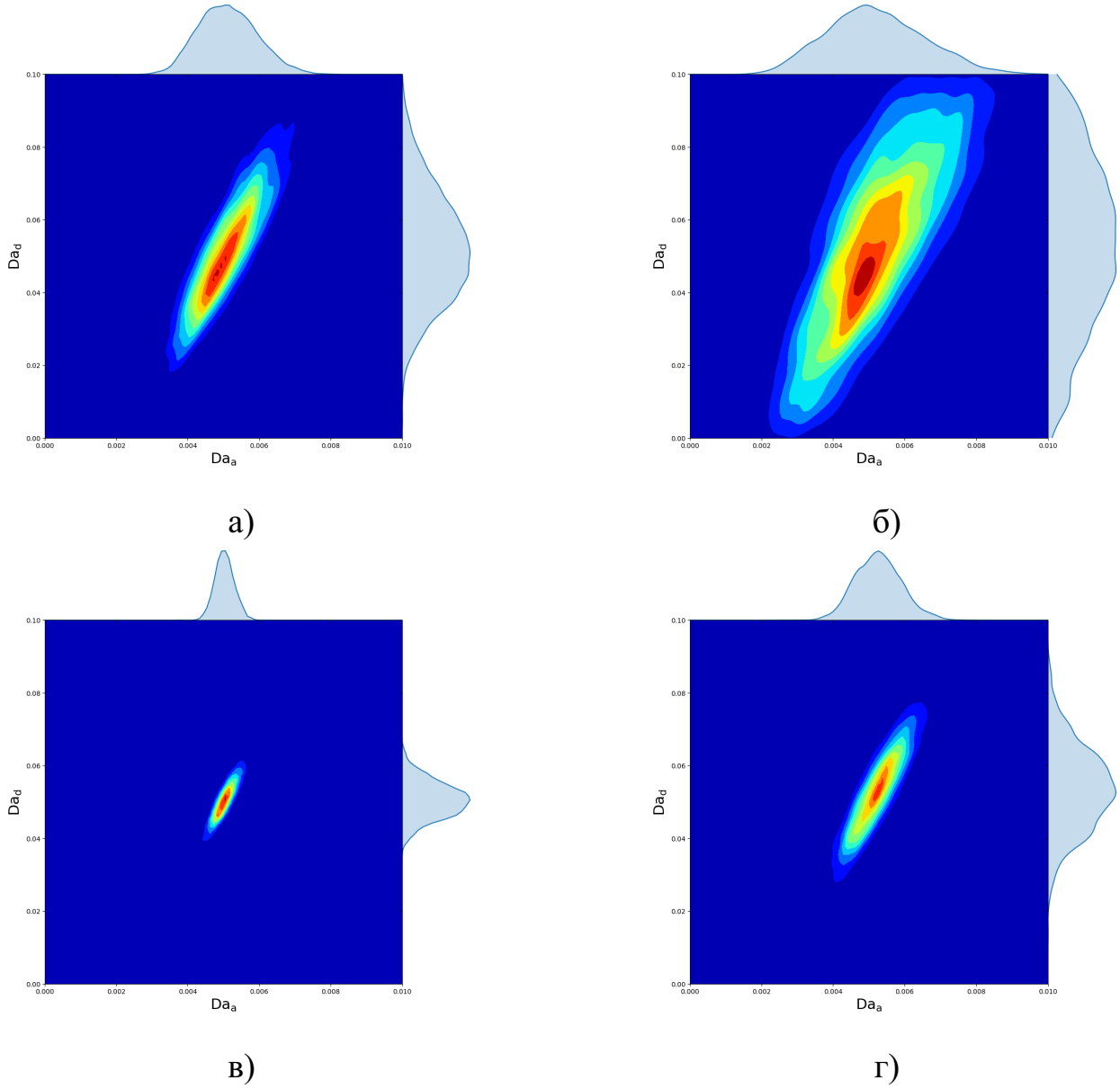
Доказано, что эта форма адаптации эргодична [147]. Необходимо обратить внимание на то, что такая же адаптация, но с фиксированной длиной истории обновлений, не является эргодической. Выбор длины начальной неадаптивной части моделирования, n_0, является свободным. Адаптация не требуется на каждом временном шаге, только через определенные интервалы. Эта форма адаптации улучшает свойства смешивания (цепи Маркова) алгоритма, особенно для больших размерностей. В нашей работе мы выбираем n_0 равным 30. Роль параметра ε состоит в том, чтобы гарантировать что C_n не станет сингулярным. В большинстве практических случаев ε можно безопасно обнулить. Параметр масштабирования обычно принимается равным $s_d = 2,4^2/d$ [147].

Авторы работы [148] доказали замечательный результат: при $d \to \infty$ оптимальный уровень приема составляет точно 0.234, а при одномерном случае 0.44. Это существенное уточнение общего принципа, согласно которому уровень приема должен быть далек от 0 и далек от 1.

3.5 Результаты

Байесовская оценка с использованием выборки МСМС для идентификации скоростей адсорбции и десорбции выполняется в сочетании с реагирующим потоком, учитываемым в масштабе пор. Реагирующий перенос регулируется уравнениями Стокса несжимаемой жидкости в сочетании с уравнением конвекции-диффузии для переноса частиц. Адсорбция и десорбция учитываются с помощью граничных условий третьего рода. Для описания условий ре-

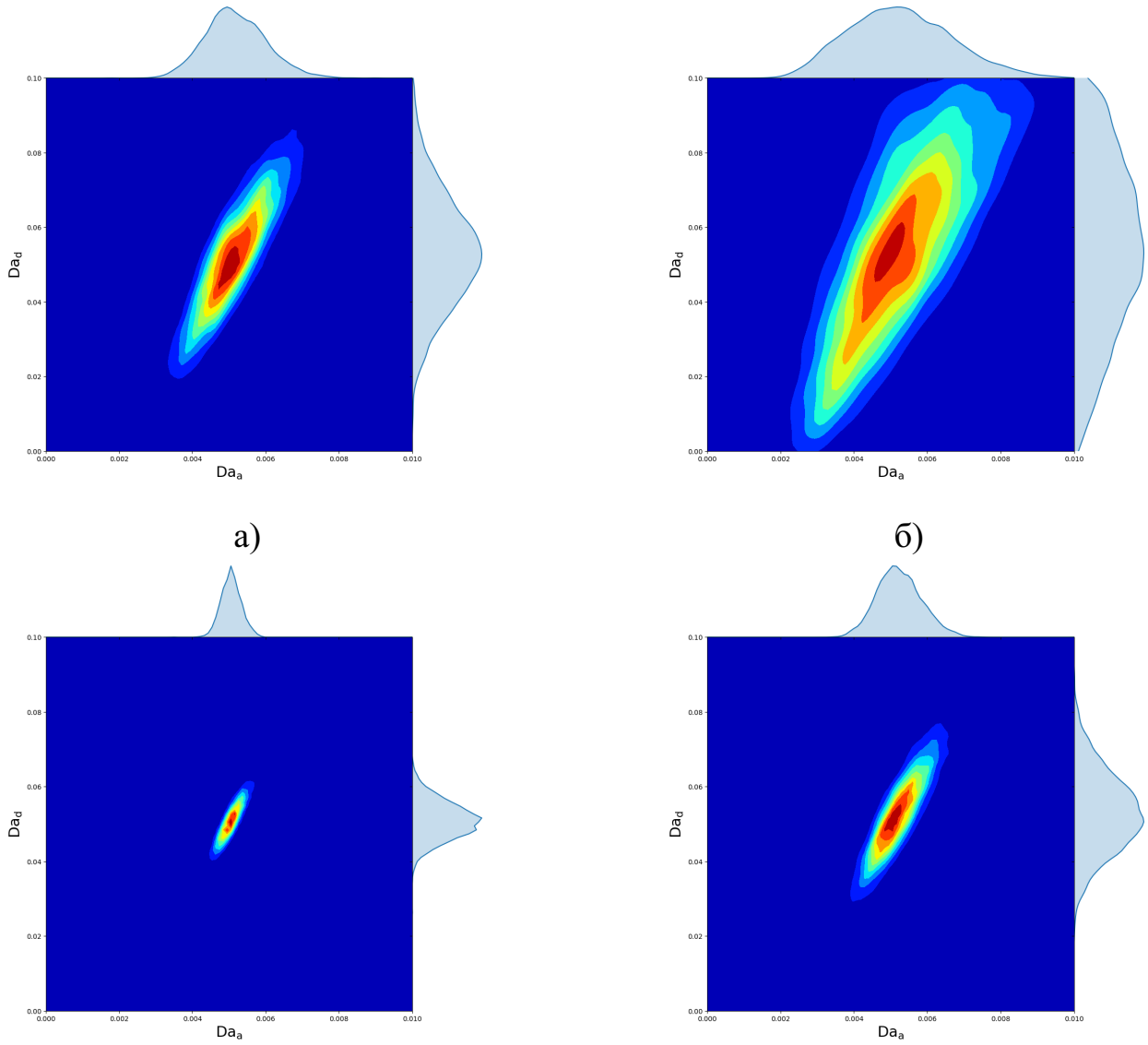
акции используется изотерма Генри. Для проведения процедуры идентификации предусмотрены синтетические экспериментальные измерения концентрации на границе выхода области. Реализованы алгоритмы Метрополис-Гастингс и Адаптивный Метрополис.



а) б)

в) г)

Рисунок 3.2: Выходы MCMC для MH, где были получены результаты для: а) измерения с дисперсией шума 0.01, б) измерения с дисперсией шума 0.05, в) десять различных измерений с отклонением шума 0.01, г) десять различных измерений с отклонением шума 0.05.



а) б)

в) г)

Рисунок 3.3: Выходы MCMC для AM, где результаты были получены для: а) измерения с дисперсией шума 0.01, б) измерения с дисперсией шума 0.05, в) десять различных измерений с отклонением шума 0.01, г) десять различных измерений с отклонением шума 0.05.

Рисунки 3.2 и 3.3 ясно показывают, что более высокая амплитуда шума приводит к большей неопределенности, а большее количество данных наблюдений приводит к более точной оценке параметров. Результаты MH представлены на Рис. 3.2 а AM представлена на Рис. 3.3. Как мы видим, результаты довольно схожи, и результаты AM получены без дорогой процедуры настройки предло-

	Da_a^{mean}	Da_d^{mean}	Da_a^{max}	Da_d^{max}	$\varepsilon_{rel}^{mean}, \%$	$\varepsilon_{rel}^{max}, \%$
0.01 одно МН	0.005127	0.05177	0.00498	0.04911	0.109	0.056
0.01 одно АМ	0.005187	0.05342	0.00497	0.04891	0.158	0.064
0.01 десять МН	0.005103	0.05054	0.00503	0.05046	0.138	0.025
0.01 десять АМ	0.005057	0.05093	0.00502	0.05041	0.047	0.018
0.05 одно МН	0.005267	0.05520	0.00486	0.04634	0.233	0.177
0.05 одно АМ	0.005332	0.05583	0.00485	0.04602	0.275	0.194
0.05 десять МН	0.005267	0.05369	0.00511	0.05076	0.228	0.134
0.05 десять АМ	0.005241	0.05315	0.00511	0.05063	0.212	0.127

Таблица 3.1: Результаты оцененных параметров при точных значениях $\mathrm{Da}_a = 0.005$ и $\mathrm{Da}_d = 0.05$.

жения методом проб и ошибок, как в алгоритме МН.

В таблице 3.1, Рис. 3.4 и Рис. 3.5 мы используем следующее правило для описания: "σ^2 N Alg" , где σ^2 — обозначает дисперсию шума, N — количество измерений прописью, а затем название алгоритма МСМС. Например, "0.01 десять МН" означает дисперсию шума 0.01 для десяти измерений, отобранных с помощью алгоритма Метрополиса-Гастингса.

Чтобы получить более количественную оценку качества выборки, мы смотрим на ее корреляционную структуру. Автокорреляция сигнала — это полезный инструмент для анализа независимости реализаций. Расчет автокорреляции состоит в следующем: по сгенерированной выборке $\{x_1, x_2, ..., x_M\}$ размера $M = 15000$, вычислить среднее,

$$\bar{x} = \frac{1}{M} \sum_{j=1}^{M} x_j, \tag{3.7}$$

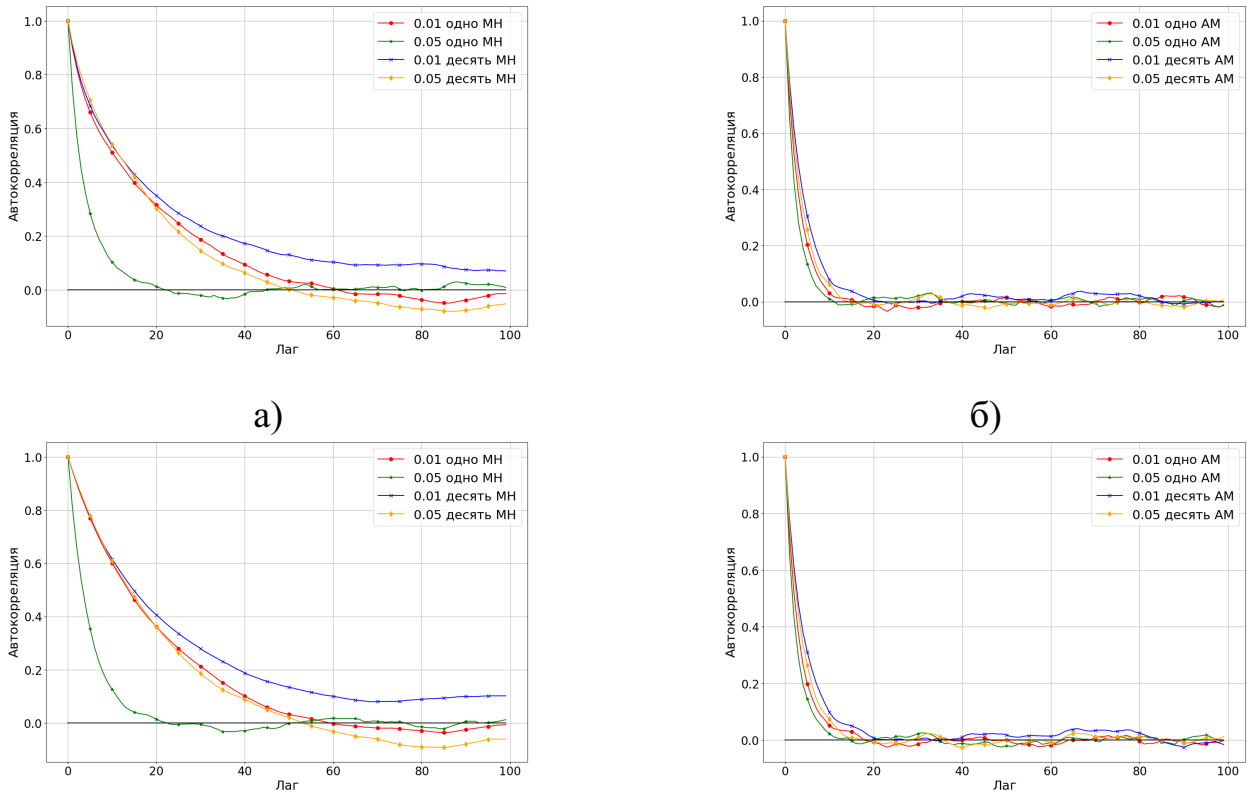


Рисунок 3.4: Функции автокорреляции первой строки для переменной Da_a, во второй строке функции автокорреляции для переменной Da_d. Первый столбец — алгоритм МН, второй столбец — алгоритм АМ.

и запаздывающие автокорреляции центрированных компонент,

$$ACF(x,k) = \frac{1}{\|z\|^2} \sum_{j=1}^{M-k} z_{j+k} z_j, \quad z_j = (x_j - \bar{x}). \tag{3.8}$$

Автокорреляции всех случаев для МН и АМ, представлены на рисунках 3.4а и 3.4б соответственно. Как видим, АМ показывает себя намного лучше. Для алгоритма АМ авторреляция быстро падает, что говорит нам о том, что цепочка хорошо перемешана. Алгоритм МН обычно имеет высокую автокорреляцию, поскольку он имеет марковское свойство (каждая последующая выборка рисуется с использованием текущей выборки).

При настройке алгоритма МН мы смотрели на коэффициент приемлемости. Скорость принятия зависит от проблемы, но обычно для одномерных задач ско-

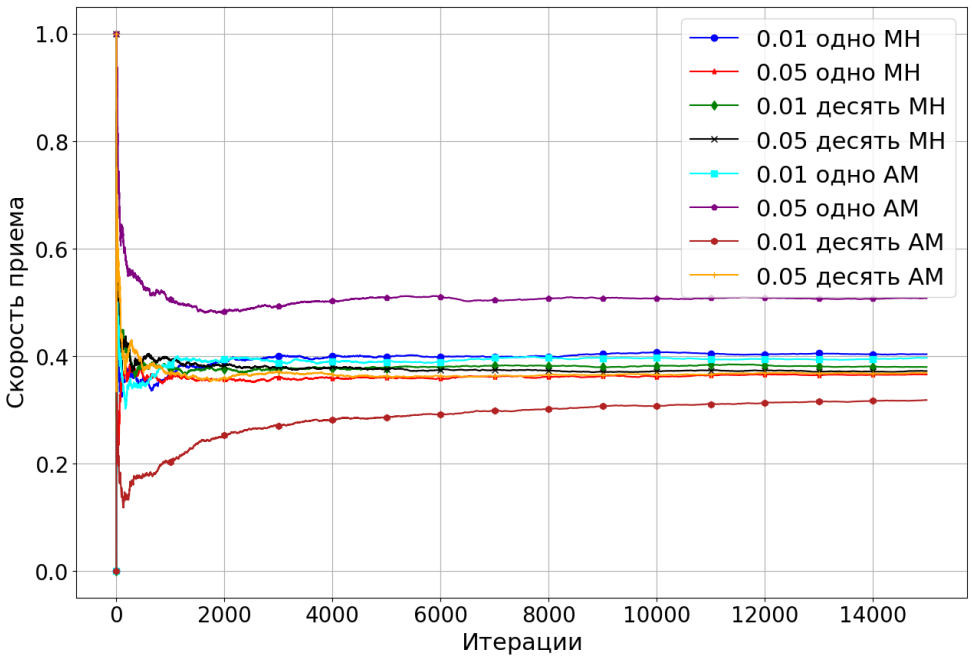


Рисунок 3.5: Показатель приемки за итерацию для всех случаев.

рость приема должна быть около 0.44 для одного параметра и около 0.234 для более чем 5 параметров, как мы упоминали ранее. На Рис. 3.5 нанесена скорость приема по итерациям для всех случаев, которые мы здесь рассматриваем. Почти для всех случаев коэффициент приемлемости составляет около 0.4, за исключением двух случаев: АМ с одним измерением с дисперсией шума 0.05 и АМ с десятью измерениями с дисперсией шума 0.01. В первом случае это произошло из-за того, что целевой функционал, пропорциональный апостериорному распределению, очень велик и, следовательно, имеет большую степень принятия. По этой же причине на Рис. 3.4a, случай с дисперсией шума 0.05 для одного измерения имеет небольшую автокорреляцию: алгоритм МН предлагает большой шаг, поэтому выборки удаляются друг от друга и корреляция между ними уменьшается. Во втором случае, наоборот, это произошло из-за того, что целевой функционал, пропорциональный апостериорному распределению, имеет очень малые размеры и, следовательно, малую степень принятия.

Из апостериорной PDF мы можем вычислить байесовский доверительный интервал, который является самым коротким интервалом, который содержит

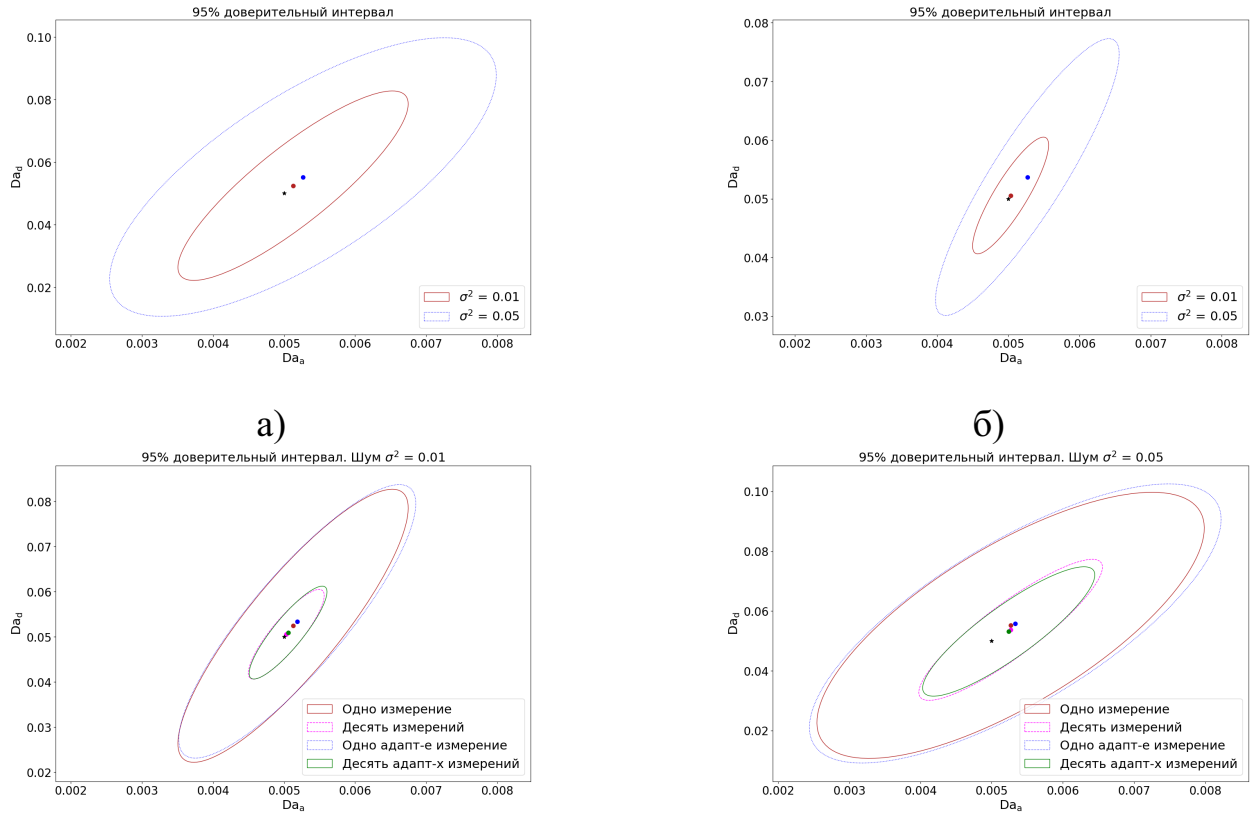


Рисунок 3.6: 95% доверительный интервал для: а) данные одного наблюдения для разных дисперсий шума, б) десять данных наблюдений для различных дисперсий шума, в) сравнение с шумом $\sigma^2 = 0.01$, г) сравнение с шумом $\sigma^2 = 0.05$.

95% вероятности. Это означает, что для данных наблюдений существует вероятность 95% того, что истинное значение $\boldsymbol{\theta}$ попадает в допустимый интервал. На Рис. 3.6в и Рис. 3.6г мы видим, что МН и АМ имеют лишь небольшие различия: АМ немного меньше. На самом деле это совершенно нормально, так как не может быть лучше или хуже хорошо настроенного алгоритма МН. Мы можем также видеть на этих рисунках, насколько доверительные интервалы уменьшаются с добавлением наблюдений. Полученные результаты даже для дисперсии шума 0.05 сравнимы с работой, которую мы проделали ранее во второй главе (смотрите также [22, 128]) с помощью детерминированного и стохастического подходов с использованием последовательностей Соболя. Символ ★ на этих

рисунках показывает точные параметры, а символ • — средние значения.

Из результатов моделирования в Таблице 3.1 мы видим, что оценочные средние и максимальные значения PDF имеют относительную ошибку менее 1%, что является очень хорошим результатом. Последние два столбца таблицы показывают ошибку в норме L_2 и уже преобразованы в проценты.

3.6 Выводы

Мы рассмотрели определение скоростей поверхностных реакций, а именно, параметров адсорбции и десорбции в переносе раствора в пористой среде с использованием выборки МСМС в рамках байесовского подхода. Процедура идентификации параметров осуществляется по измеренной концентрации раствора на выходе из области. Реализованы алгоритмы Метрополиса-Гастингса и Адаптивный Метрополис. Проведены сравнения между двумя алгоритмами через функции автокорреляции. Доверительные интервалы были построены на основе апостериорных распределений для обоих алгоритмов. Исследовано влияние шума на измерения для байесовской процедуры оценки. Количество экспериментальных данных было увеличено до десяти для обоих алгоритмов, чтобы сузить доверительный интервал. Анализ выборки с использованием автокорреляционной функции и скорости приема выполняется для оценки смешения цепи Маркова. Установлено, что выборка МСМС достаточно хороша для определения допустимого набора параметров через доверительный интервал для обоих алгоритмов, однако, предпочтителен Адаптивный Метрополис, поскольку в ней нет необходимости в "настройке" алгоритма.

Глава 4

Эвристический подход для идентификации параметров

В этой главе предложена модификация стандартного алгоритма пчелиного роя (Standard Bees Algorithm, SBA) [131], которая является поведенческим методом. Поведенческие методы — это многоагентные методы, основанные на моделировании интеллектуального поведения колоний агентов (интеллект роя). Модификация предлагает более агрессивный поиск не только глобального экстремума функционала невязки, но и локальных экстремумов. Тестовые запуски на известных тестовых функциях явно демонстрируют это свойство. Проведено статистическое сравнение предложенного алгоритма с двумя другими концептуально различными пчелиными алгоритмами, а именно, со стандартным пчелиным алгоритмом и искусственной пчелиной колонией на 100 независимых прогонах тестовых функций. Предложенная модификация хорошо справляется с определением области допустимых значений при условии умеренного количества экстремумов. Модифицированный алгоритм применен для минимизации функционала невязки в случае доминирующей диффузии, когда функционал выпуклый, и в случае доминирующей реакции, когда функционал имеет форму узкой долины с крутыми берегами [130].

4.1 Алгоритмы пчелиной колонии

Всего различают два алгоритма, которые основаны на одной идее, но имеют разные механизмы работы. Каждый из этих алгоритмов имеет множество различных модификаций. Первым стоит упомянуть Алгоритм Пчел (Bees Algorithm, BA), который был впервые описан Фамом и Ганбарзадехом и др. в 2005 г. [149, 150] и далее модифицирован самим автором до полноценно-

го универсального метаэвристического алгоритма с окончательным названием Стандартный Алгоритм Пчел (Standard Bees Algorithm, SBA) [131, 151]. Он имитирует поведение колоний медоносных пчел в поисках пищи. Подробнее об эффективности и конкретных возможностях этого алгоритма можно узнать в [152–154]. Второй, это Алгоритм Искусственной Пчелиной Колонии (Artificial Bee Colony, ABC), который был представлен Карабогой в 2005 году [155]. Этот алгоритм представляет собой метаэвристический алгоритм на основе роя. Подробнее о производительности и сходимости алгоритма можно посмотреть в следующих работах [156, 157]. Эти два алгоритма очень похожи с точки зрения процессов локального и глобального поиска. Однако есть разница между обоими алгоритмами в процессе поиска окрестности. ABC имеет вероятностный подход на этапе соседства; однако SBA не использует вероятностный подход, а вместо этого использует оценку пригодности для управления поиском. Преимуществами этого семейства алгоритмов являются их применимость к невыпуклым функционалам, возможность обобщения на любую размерность и высокая степень параллелизма.

Стандартный алгоритм пчелиной колонии

Алгоритм пчел является вдохновленным природой интеллектуальным методом, который нашел применение в широком круге сложных задач оптимизации [158, 159]. Основная идея лежащая в основе этого алгоритма состоит в том, чтобы смоделировать поведение медоносных пчел при поиске пищи. В соответствии с этой моделью, агенты имитирующие пчел-разведчиков случайным образом исследуют пространство решений в поисках областей высокой пригодности. Разведчики, которые нашли наиболее многообещающие решения, вербуют посредством виляющего танца [160] других агентов (пчел-собирателей) для локального поиска. Локальный поиск ведется параллельно на разных площадках, то есть в пределах окрестностей, сосредоточенных на отмеченных разведчика-

ми решениях.

Помимо алгоритма, описанной в работе [149, 150], существует множество различных вариантов алгоритма пчел. В недавнем обзоре [151] были выделены три основные ветви алгоритма пчел, а именно базовый алгоритм пчел (Basic Bees Algorithm, BBA), основанный на уменьшении алгоритм пчел (Shrinking-based Bees Algorithm, ShBA) и стандартный алгоритм пчел (Standard Bees Algorithm, SBA).

BBA относится к базовой форме алгоритма пчел, который упоминается в нескольких статьях (смотри [152, 161–163]) и выполняет параллельный локальный поиск с использованием фиксированных локальных областей (без сужения). ShBA [150] включает процедуру сжатия локальной области. Эвристика заключается в том, чтобы интенсифицировать усилия по эксплуатации по мере продвижения локального поиска, фокусируя выборку на все более меньших областях пространства решений. Наконец, SBA, названный так в многочисленных статьях (смотри, например [152, 164, 165]), включает в себя процедуры сжатия локальной области и отказа от области. Эвристика отказа от локальной области заключается в том, чтобы покинуть её, когда локальный поиск застопорился, чтобы не попасть в ловушку локальных экстремумов функционала.

Алгоритм итеративно ищет лучшие решения для заданной задачи оптимизации. Алгоритм завершается, когда выполняется критерий остановки (например, прошло заданное количество циклов оптимизации, найдено решение удовлетворительного качества). Алгоритм состоит из следующих управляющих параметров:

- количество пчел-разведчиков, используемых только для глобального поиска, ns;
- количество локальных областей, на которых выполняется локальный поиск, nb;
- количество привлеченных пчел-собирателей для каждого из nb участков,

nr;

- количество циклов локального застоя до того, как участок будет заброшен, $stlim$;
- начальный размер nb локальных областей, ngh;
- параметр сжатия окрестности, α, где $0 < \alpha < 1$.

Алгоритм представлен ниже в виде псевдо-кода в Алгоритме 1.

Алгоритм искусственной пчелиной колонии

Алгоритм искусственной пчелиной колонии (ABC) является полностью искусственным интеллектом и прекрасно себя показал на бенчмарк функциях вплоть до 50-ой размерности. Как мы могли видеть в предыдущем разделе, алгоритм SBA имел слишком много контрольных параметров сам по себе, что могло усложнить работу неподготовленного исследователя, также могло послужить фактором повышения цены решения задачи из-за необходимости настройки управляющих параметров для достижения хороших результатов. ABC был предложен профессором Карабогой [156] в 2005 году, благодаря преимуществам с точки зрения простой концепции, меньшего количества управляющих параметров, простоты реализации и хороших эффектов оптимизации. Далее в следующих работах профессор Карабога со своими соавторами сравнили ABC с другими эволюционными алгоритмами и установили, что производительность ABC была выше или, по крайней мере, аналогична другим алгоритмам интеллектуальной оптимизации. В силу этого, алгоритм ABC широко используется при решении различных задач оптимизации [166–169].

Алгоритм искусственной пчелиной колонии — это своего рода бионический алгоритм, основанный на модели самоорганизации и интеллекта роя пчелиной колонии в природе. Пчелиная колония состоит из работающих пчел, пчел-наблюдателей и пчел-разведчиков. Расположение источника пищи представляет собой решение проблемы, а количество источников пищи равно количеству

Алгоритм 1: Псевдокод стандартного алгоритма пчелиной колонии.

Инициализировать начальную популяцию пчел P, которая создается решением $ns + nr \cdot nb$ точек в области N-мерного пространства поиска;

Каждое решение s^g означает центр локальной области s, с начальными размерами $s^e = ngh * (M - m)$, где M - верхний предел и m - нижний предел интервала переменных;

Установить параметр стагнации $s^{ttl} = stlim$;

while *Условие остановы не выполнится* **do**

  Выбираются лучшие nb области с высшим количеством нектара, а остальные удаляются из популяции;

  for *Для каждой* nb *области* **do**

    if $sttl = 0$ **then**

      Область оставляется, nr новых решений выбирается случайным образом из области поиска;

      Решение с высшим количеством нектара выбирается как новая локальная область s, с начальными размерами $s^e = ngh * (M - m)$ и $s^{ttl} = stlim$;

    end

    if $sttl > 0$ **then**

      nr решений случайным образом выбираются с равномерным распределением внутри локальных областей и выбирается решение ν с самым большим значением, пока остальные отбрасываются ;

      if $F(\nu) > F(s^g)$ **then**

        ν заменяет s^g и становится центром для локальной области;

        $s^{ttl} = stlim$, s^e остается неизменным;

      end

      if $F(\nu) \leq F(s^g)$ **then**

        локальный поиск в стагнации, поэтому область должна сузиться $s^e = \alpha s^e$;

        $s^{ttl} = s^{ttl} - 1$;

      end

    end

    ns новых решений (пчелы разведчики) ищется в области поиска (глобальный поиск);

    Они становятся центрами новых ns локальных областей, где каждый инициализирован с $s^e = ngh * (M - m)$ и $s^{ttl} = stlim$;

    nb разведчики маркируют центры областей развитых локальным поиском, а ns разведчики глобальным поиском, тем самым создавая новую популяцию P;

  end

end

занятых пчел (пчел-наблюдателей). Сначала пчелы ищут источник пищи. Затем каждая пчела-наблюдатель выбирает источник пищи на основе количества

нектара, найденного пчелами. Источник пищи, имеющий более высокую пригодность, будет иметь более высокую вероятность быть выбранным наблюдателями, чем источник с худшей пригодностью. Позже каждая пчела-наблюдатель ищет ближайший источник пищи вокруг выбранного источника и резервирует лучший из них. Если не улучшить источник пищи в течение ограниченного времени, связанная пчела превратится в пчелу-разведчика и случайным образом найдет новый источник пищи. Основное различие алгоритма ABC от SBA это то, что при движении, пчелы опираются на вероятность, полученную через (4.1). Движение происходит методом выбора рулетки, где найденные вероятно-

сти играют роль веса.

Алгоритм 2: Алгоритм искусственной пчелиной колонии

Инициализация параметров: $ColonySize(CS), MaximumCycleNumber(MCN), limit, trial(i)$;

Создать начальную популяцию с помощью равномерного распределения;

for $cn = 1$ *: MCN* **do**

  for $i = 1$ *: CS* **do**

    Случайно выбрать j из $1, 2, \cdots, D$;

    Случайно выбрать k из $1, 2, \cdots, CS, k \neq i$;

    $\widehat{X}_{ij} = X_{i,j} + \phi_{ij}(X_{i,j} - X_{k,j}) \qquad \phi_{ij} \in [-1.0, 1.0]$

    if $f(\widehat{X}_i) < f(X_i)$ **then**

      $X_i = \widehat{X}_i$;

      $trial(i) = 0$;

    end

    else

      $trial(i) = trial(i) + 1$;

    end

  end

  $p_i = fit_i / \sum_{n=1}^{CS} fit_n$;

  for $t = 1$ *: CS* **do**

    Случайно выбрать j из $1, 2, \cdots, D$;

    Методом рулетки выбрать i из $1, 2, \cdots, CS$ в соответствии с вероятностью p_i;

    Случайно выбрать k из $1, 2, \cdots, CS, \quad k \neq i$;

    $\widehat{X}_{ij} = X_{i,j} + \phi_{ij}(X_{i,j} - X_{k,j}) \qquad \phi_{ij} \in [-1.0, 1.0]$

    if $f(\widehat{X}_i) < f(X_i)$ **then**

      $X_i = \widehat{X}_i$;

      $trial(i) = 0$;

    end

    else

      $trial(i) = trial(i) + 1$;

    end

  end

end

Обновить лучшее решение;

for $i = 1 : CS$ **do**

  if $trial(i) > limit$ **then**

    Заменить X_i новым случайно выбранным местом;

    trial(i) = 0;

  end

end

Запомнить самое лучшее решение.

Перечислим управляющие параметры алгоритма ABC: CS — размер колонии, D — размерность, MCN — максимальное число итераций, параметр $limit$ вычисляется как $(0.5 \cdot CS \cdot D)$. Как мы можем видеть, для работы с этим алгоритмом, необходимо задать только три параметра, четвертый сам вычисляется по формуле от двух заданных параметров. Параметр ϕ это равномерно распределенное случайное число в диапазоне $[-1, 1]$. После того как качество нового источника вычислено, значение fit_i вычисляется следующей формулой:

$$fit_i = \begin{cases} \frac{1}{1+f_i} & f_i \geq 0 \\ 1 + abs(f_i) & f_i < 0 \end{cases} \tag{4.1}$$

Алгоритм представлен в виде псевдо-кода в Алгоритме 2.

Модифицированный алгоритм пчелиной колонии

Нами разработана модификация пчелиного алгоритма (Modified Bee Colony, MBC) с целью его адаптации к задачам идентификации параметров, связанных с преобладанием реакции, что требует минимизации функционала (2.1). В этом случае приходится решать невыпуклую оптимизационную задачу, а функционал имеет вид узкой долины с крутыми берегами. Кроме того, мы не ищем точку глобального экстремума, мы ищем подмножество в пространстве параметров, для которого функционал ниже заданного порога.

Опишем идею используемого здесь алгоритма MBC. Существуют пчелы-разведчики sb, которые проводят случайные поиски. После изучения местности, судя по количеству найденного нектара, местность делится на несколько локальных участков. Для разделения области поиска на локальные области используется евклидово расстояние. Это делается с целью эффективного размещения локальных участков, чтобы на начальном этапе они не пересекались друг с другом. Области ранжируются по количеству нектара, найденного в каждой из них. Первые n областей называются лучшими локациями, куда направляется больше пчел-агентов abb на единицу площади; остальные области из

m называются перспективными локациями, и в каждую из них направляется меньше пчел-агентов abp. Локальные области центрируются в точках, которые были определены пчелами-разведчиками, и области могут быть прямоугольными или круглыми по форме. Размеры локальных площадей следует выбирать на основе обоснованного предположения в зависимости от диапазонов параметров. Все пчелы, работающие в своих местах, могут обыскивать свою территорию, чтобы увеличить количество нектара. Если пчелы не могут улучшить результат за определенное время τ, они сужают область поиска в ξ раз. Алгоритм останавливается, если расстояние между найденными экстремумами в локальных областях достигает заданного расстояния ε_1 или размер локальной области становится меньше ε_2. Порог ε_2 зависит от задачи.

В целом, наша реализация алгоритма требует следующих параметров контроля, а именно:

- Количество лучших локаций, n;
- Количество перспективных локаций, m;
- Длины сторон локальной области $\mathbf{d} = \{d_1, d_2, ..., d_i\}$, где i обозначает размерность задачи;
- Значение евклидова расстояния между двумя точками в пространстве параметров, δ;
- Количество пчел-разведчиков, sb;
- Количество пчел-агентов в лучших локациях, abb;
- Количество пчел-агентов на перспективных локациях, abp;
- Максимальное количество итераций, разрешенных для одного местоположения τ перед сжатием;
- Критерии остановки ε_1 и ε_2 для контроля расстояния между лучшими точками в одной локальной области для двух последовательных итераций и для контроля размера локальной области соответственно.

Равномерное распределение используется для размещения пчел-

разведчиков во всей области в начале, а также для размещения пчел в каждой локальной области на каждой итерации по области. Форма локальных подобластей прямоугольная. Более точное описание дано в Алгоритме 3.

Кратко обсудим особенности используемого здесь алгоритма MBC:

- Этот алгоритм демонстрирует грамотное деление на локальные области через евклидово расстояние;
- Уменьшение площади происходит после τ неудачных попыток, а не после каждой неудачи, что снижает вероятность пропуска локальных минимумов;
- Агрессивное сжатие области для достижения более быстрой сходимости и большей точности (адаптировано для рассматриваемого здесь класса задач);
- При нахождении локального экстремума он сохраняется, и пчёлы из локальной области исчезают; в то же время поиски в других районах продолжаются;
- Критерии остановки проверяются для каждой локации индивидуально.

Дадим еще несколько пояснений по каждому пункту. Семейство BA концептуально разработано для поиска только глобального экстремума, поэтому после каждой итерации значения функционала сортируются глобально, и для продолжения поиска выбираются несколько наиболее перспективных точек. В нашей модификации сортировка и отбор производятся локально для каждой локальной активной области, что позволяет находить локальные экстремумы. В исходном алгоритме площадь уменьшается, если после текущей итерации не наблюдается улучшения результатов. Вместо этого в нашей модификации допускаются τ-итерации до того, как область уменьшится. Это позволяет увеличить плотность пчел, исследующих территорию. Такой вариант имеет преимущества для функционалов, подобных рассмотренному здесь. Можно начать с небольшого количества пчел на единицу площади и таким образом дешево

Алгоритм 3: Псевдокод модифицированного алгоритма пчелиной колонии.

```
Инициализировать пчел-разведчиков (sb);
Отсортируйте их по ценности нектара;
Через δ разделить на локальные области;
for Все области (n + m) do
    Установить начальное лучшее значение для региона;
    Установите ξ равным нулю;
    Установить локальную область поиска;
    Инициализировать локальную область, где экстремум находится в центре;
    while Пока не сойдется do
        Iteration counter += 1;
        Инициализировать пчел-агентов ;
        Сортировать их по кормовой ценности;
        if Найдено лучшее значение по сравнению со значением в центре then
            Изменить значение экстремума на новое;
            Выделите новую область поиска вокруг нового наилучшего значения;
            Установите fail = 0 ;
        else
            fail += 1;
        end
        if fail == τ then
            Установите fail = 0;
            Установите ξ += 2 ;
            Уменьшить область локального поиска ξ раз;
            if δ между лучшими значениями из двух последовательных итераций ≤ ε1 or сторона
              области локального поиска ≤ ε2 then
                Break;
            end
        end
    end
end
for Все области (n + m) do
    Вывести координаты и значения найденных экстремумов
end
```

спуститься на самое дно долины. Близко ко дну долина относительно плоская, поэтому плотность пчел приходится увеличивать. Это делается либо повтор-

ным поиском в той же области, либо сжатием. В нашем случае исследуется агрессивное сжатие локальной области, в отличие от наиболее известных алгоритмов пчелиного типа, с учетом формы рассматриваемого функционала. Каждое измерение соответствующей локальной области уменьшается вдвое при усадке. Это позволяет снизить вычислительные затраты и повысить точность. SBA ввел понятие процедуры оставления локальной области: когда место заброшено, пчела становится разведчиком, и процесс поиска начинается в новом месте. В нашей модификации отсутствует понятие отказа от локальной области, поскольку помимо глобального экстремума ищутся локальные экстремумы. В нашем подходе критерии остановки проверяются для каждой локальной области, а не глобально.

Запуск на тестовых функциях

Представленный здесь алгоритм МВС был реализован на Python. Для оценки его производительности и сравнения с производительностью широко используемого алгоритма ABC [155] были проведены прогоны для поиска глобальных и локальных минимумов известных тестовых функций. Несмотря на то, что все приведенные ниже функции обобщены для многомерного случая, а алгоритмы могут быть легко реализованы в многомерном случае, в данной работе исследуется только двумерный случай, чтобы облегчить визуализацию и сократить вычислительные временные затраты. Рассматриваются следующие функции:

- *Функция Шекеля (Shekel function)*. Это многомерная, мультимодальная, непрерывная, детерминированная функция, обычно используемая в качестве тестовой функции для тестирования методов оптимизации [170];
- *Функция Розенброка (Rosenbrock function)*. Это невыпуклая функция, введенная Говардом Х. Розенброком в 1960 году [171], которая используется в качестве задачи проверки производительности для алгоритмов оптими-

зации. Глобальный минимум находится внутри длинной узкой плоской долины параболической формы. Найти долину тривиально. Однако сходиться к глобальному минимуму трудно;

- *Функция Химмельблау (Himmelblau function)*. Это мультимодальная функция, используемая для проверки производительности алгоритмов оптимизации. Положения всех минимумов могут быть найдены аналитически. Однако, поскольку они являются корнями кубических многочленов, при записи в радикалах выражения несколько усложняются. Функция названа в честь Дэвида Маутнера Химмельблау, который представил ее в работе [172];
- *Функция Растригина (Rastrigin function)*. Это невыпуклая, нелинейная мультимодальная функция. Впервые она была предложена Растригиным [173] как двумерная функция и была обобщена Рудольфом [174]. Обобщенная версия была популяризирована Хоффмайстером и Бэком [175] и Мюленбейном и др. [176]. Поиск минимума этой функции является довольно сложной задачей из-за большого пространства поиска и большого количества локальных минимумов.

Определение каждой функции можно увидеть в таблице 4.1. Трехмерные графики каждой функции вы можете увидеть на рисунках 4.1, 4.3, 4.5, 4.7. Работу алгоритма можно увидеть на рисунках 4.2, 4.4, 4.6 и 4.8. *Голубые* точки обозначают обработанные точки, а *красные звездочки* обозначают экстремумы, найденные в каждом месте. Эти картинки показаны с целью демонстрации движения пчел. Функции Шекеля и Химмельблау довольно просты в плане нахождения экстремумов, поэтому количество лучших локаций и перспективных локаций в сумме выбиралось таким же, как и количество экстремумов. Поскольку функции Розенброка и Растригина являются довольно сложными функциями, несмотря на то, что они имеют только один глобальный минимум, мы позволили алгоритму отработать больше местоположений, чтобы повысить

вероятность успеха. Кроме того, для нас крайне важно контролировать количество вычислений функций (Number of Function Evaluation, NFE). Точные минимумы и минимумы, вычисленные МВС для четырех эталонных функций, приведены в Таблице 4.2 вместе с количеством итераций и NFE. Как видно, алгоритм очень хорошо работает на всех тестах. Все графики построены с использованием библиотеки matplotlib [138].

Функция	**Формула**	**Область**
Шекель	$F(x,y) = -\frac{1}{1+(x-2)^2+(y-10)^2} - \frac{1}{2+(x-10)^2+(y-15)^2} - \frac{1}{2+(x-18)^2+(y-4)^2}$	$D = \{(x,y) \mid x \in [0,20], y \in [0,20]\}$
Розенброк	$F(x,y) = 100(y-x^2)^2 + (1-x)^2$	$D = \{(x,y) \mid x \in [-5,5], y \in [-5,5]\}$
Химмельблау	$F(x,y) = (x^2+y-11)^2 + (x+y^2-7)^2$	$D = \{(x,y) \mid x \in [-10,10], y \in [-10,10]\}$
Растригин	$F(x,y) = 20 + x^2 + y^2 - 10(cos(2\pi x) + cos(2\pi y))$	$D = \{(x,y) \mid x \in [-5,5], y \in [-5,5]\}$

Таблица 4.1: Описания бенчмарков

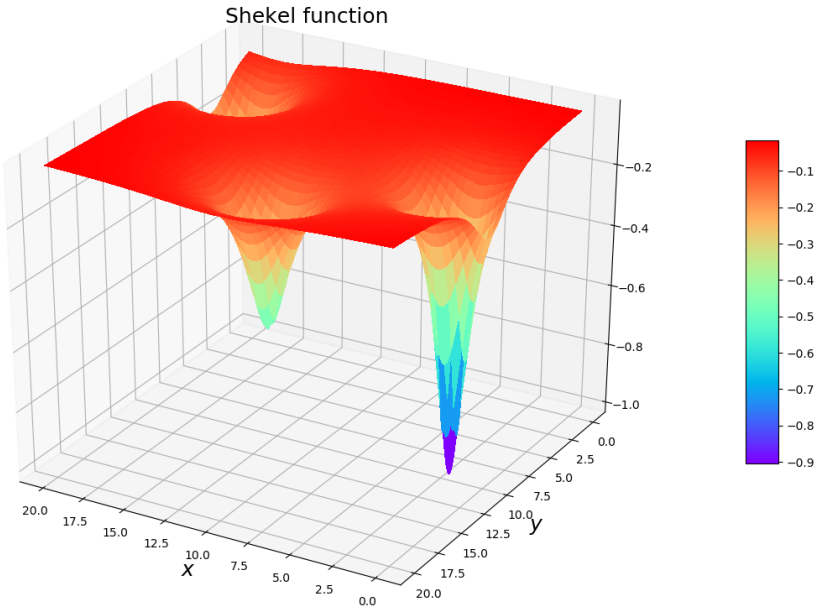


Рисунок 4.1: Трехмерный график функции Шекеля

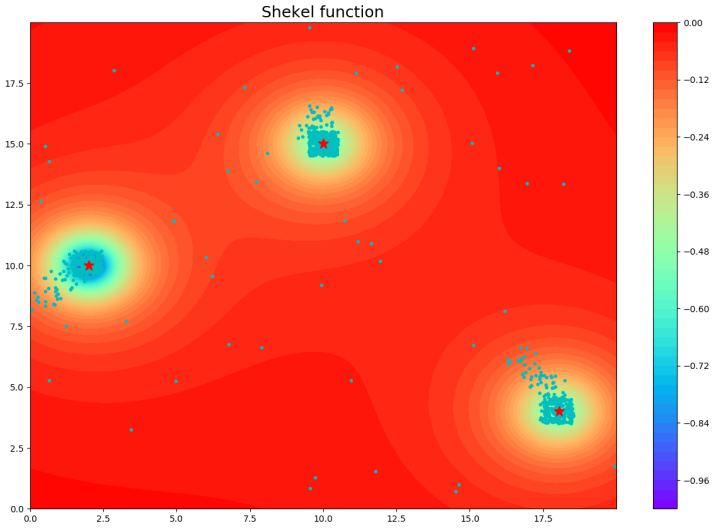


Рисунок 4.2: Результат алгоритма MBC

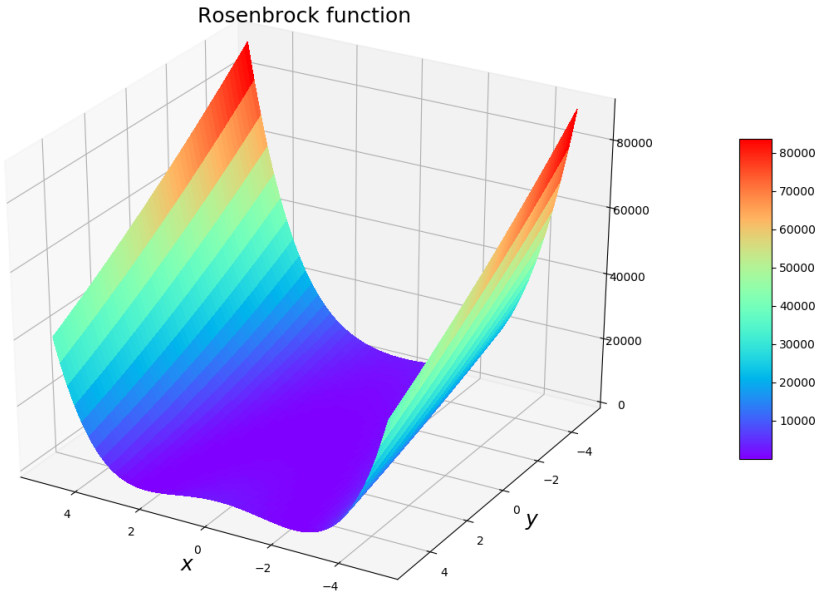


Рисунок 4.3: Трехмерный график функции Розенброка

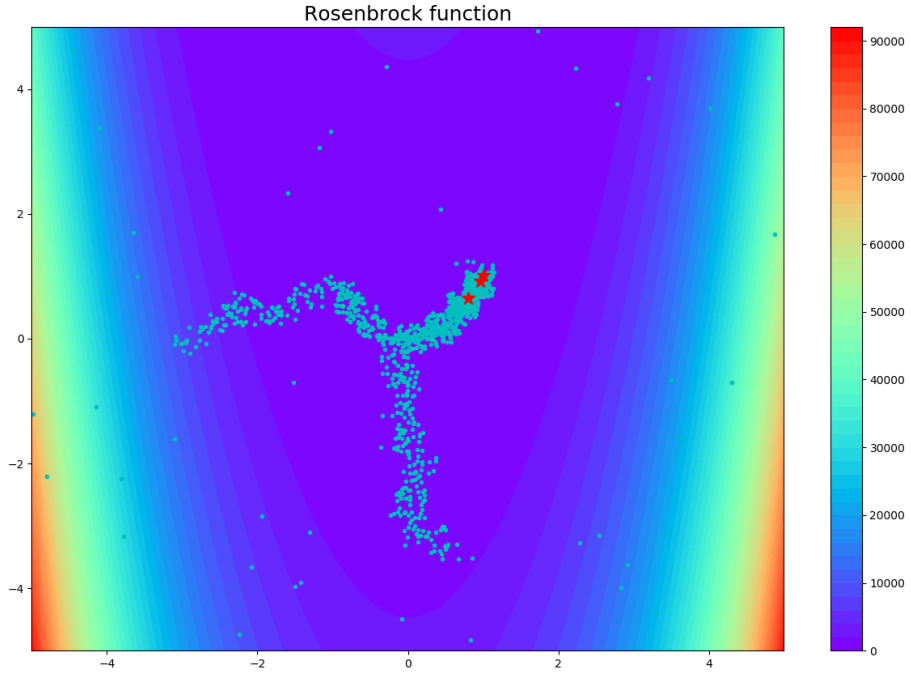


Рисунок 4.4: Результат алгоритма MBC

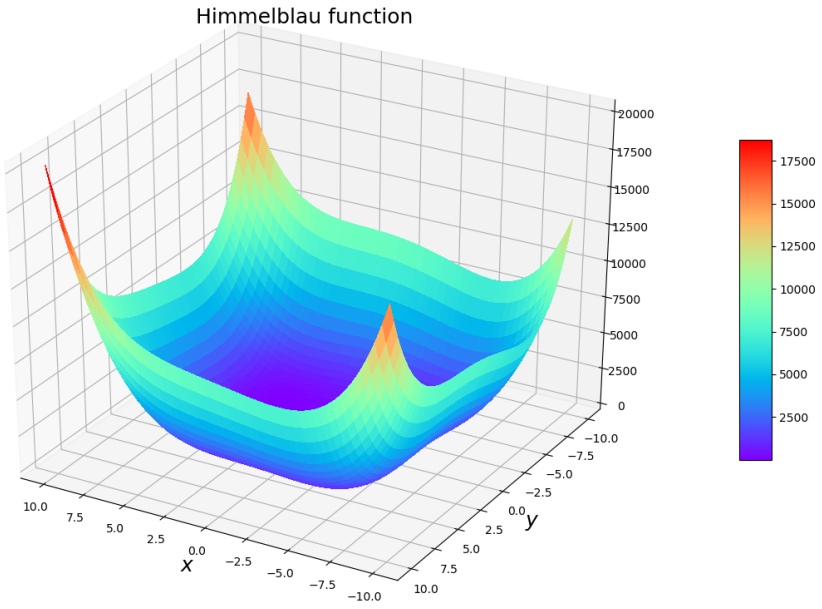


Рисунок 4.5: Трехмерный график функции Химмельблау

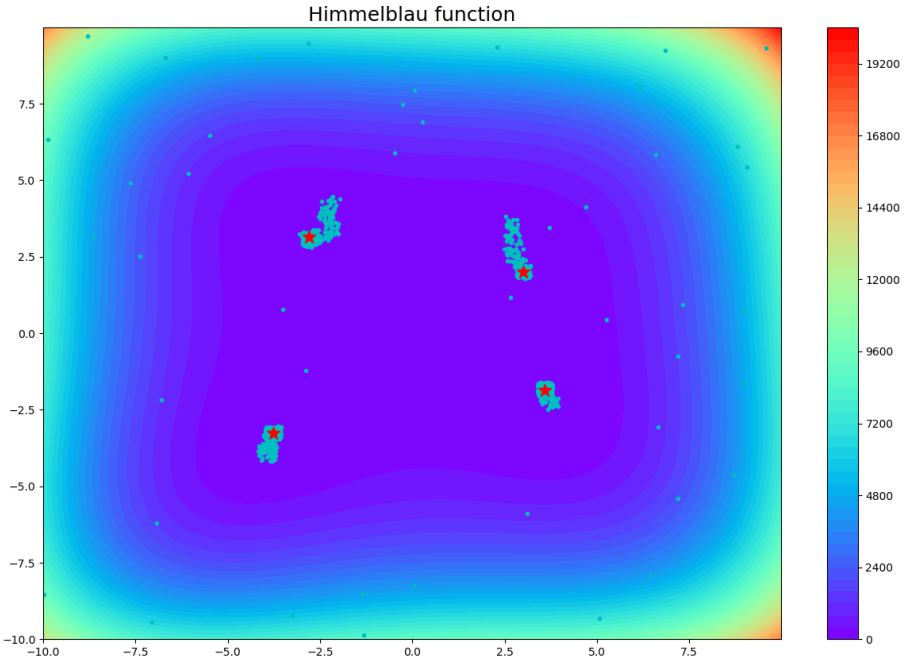


Рисунок 4.6: Результат алгоритма MBC

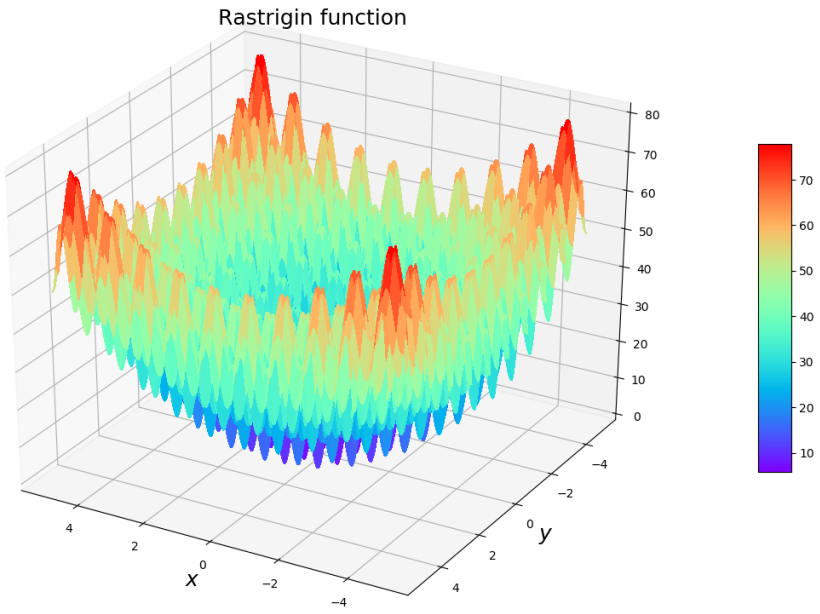


Рисунок 4.7: Трехмерный график функции Растригина

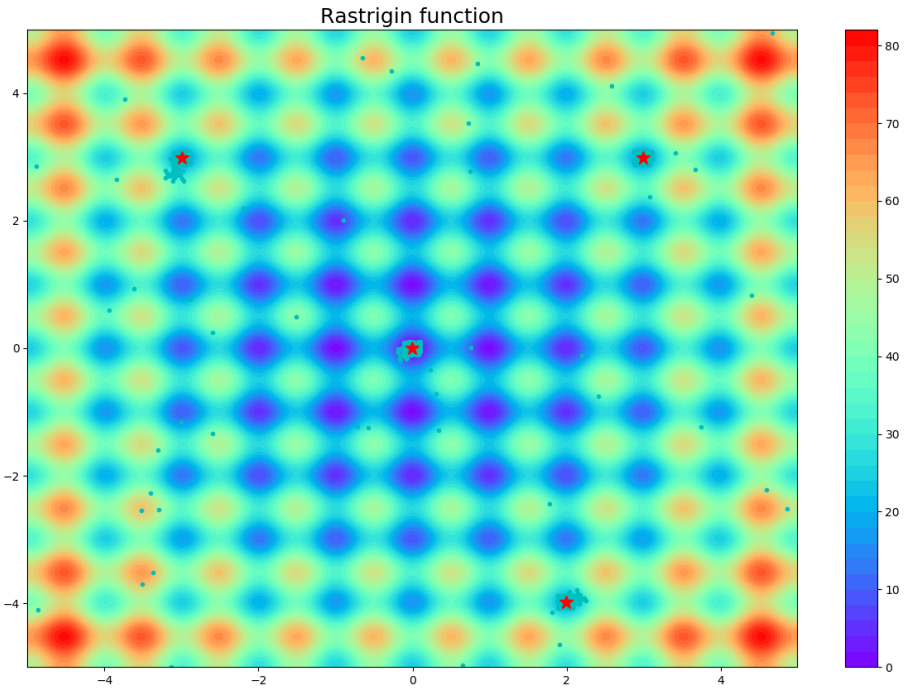


Рисунок 4.8: Результат алгоритма МВС

Функция	**Минимум**	**Вывод программы**	**Итерации**	**NFE**
Шекель	F(2,10) = -1.014 F(10,15) = -0.517 F(18,4) = -0.509	F(2.012, 10.005) = -1.014 F(9.991, 14.998) = -0.516 F(18.003, 4.008) = -0.509	93	1260
Розенброк	F(1,1) = 0	F(1.004, 1.009) = 9.134×10^{-5}	138	1630
Химмельблау	F(3.584, -1.848) = 0 F(-2.805, 3.131) = 0 F(-3.779, -3.283) = 0 F(3, 2) = 0	F(3.579, -1.856) = 0.003 F(-2.804, 3.131) = 1.356×10^{-5} F(-3.777, -3.271) = 0.005 F(3.005, 2) = 0.001	113	1650
Растригин	F(0,0) = 0	F(-0.002, -0.005) = 0.005	96	1470

Таблица 4.2: Модифицированный алгоритм пчелиной колонии.

Статистическое сравнение алгоритмов MBC, SBA и ABC

Для сравнения, SBA и более популярный алгоритм ABC использовались для нахождения минимумов одних и тех же эталонных функций. Результаты, полученные с помощью алгоритмов SBA и ABC, можно найти в таблицах 4.3 и 4.4 соответственно. В случае выпуклых функционалов алгоритм SBA работает хорошо, но проблемы возникают для невыпуклых функций Розенброка и мультимодальных функций Растригина, где алгоритм сходится очень медленно. Результаты в Таблицах 4.3 и 4.4 показывают, что алгоритмы SBA и ABC находят только глобальный минимум. Хотя эти алгоритмы основаны на одной и той же идее, концептуально и алгоритмически они разные.

Функция	**Минимум**	**Вывод программы**	**Итерации**	**NFE**
Шекель	F(2,10) = -1.014 F(10,15) = -0.517 F(18,4) = -0.509	F(1.99, 10.014) = -1.014	24	4704
Розенброк	F(1,1) = 0	F(0.979, 0.962) = 9.474×10^{-4}	53	8010
Химмельблау	F(3.584, -1.848) = 0 F(-2.805, 3.131) = 0 F(-3.779, -3.283) = 0 F(3, 2) = 0	F(-2.805, 3.132) = 5.681×10^{-5}	38	2964
Растригин	F(0,0) = 0	F(9.251×10^{-6}, 7.722×10^{-4}) = 1.183×10^{-4}	183	14,274

Таблица 4.3: Стандартный пчелиный алгоритм.

Функция	**Минимум**	**Вывод программы**	**Итерации**	**NFE**
Шекель	F(2,10) = -1.014 F(10,15) = -0.517 F(18,4) = -0.509	F(2.004, 10.018) = -1.014	215	4343
Розенброк	F(1,1) = 0	F(0.97, 0.94) = 9.039×10^{-4}	1106	22,411
Химмельблау	F(3.584, -1.848) = 0 F(-2.805, 3.131) = 0 F(-3.779, -3.283) = 0 F(3, 2) = 0	F(-2.803, 3.132) = 1.43×10^{-4}	83	853
Растригин	F(0,0) = 0	F(-1.925×10^{-5}, -4.321×10^{-4}) = 3.712×10^{-5}	161	1645

Таблица 4.4: Алгоритм искусственной пчелиной колонии.

Результаты сравнительного статистического анализа между SBA, ABC и MBC обобщены в таблице 4.5. Основным критерием сравнения было среднее значение NFE. Мы выполнили 100 независимых запусков для всех алгоритмов. Значения параметров, используемые для SBA, ABC и MBC, перечислены в таблицах 4.6–4.8 соответственно. Обозначения используемых здесь параметров соответствуют [131, 177]. Легко видеть, что SBA плохо работает для функции Растригина, поскольку имеется много локальных экстремумов, из-за чего сходится очень долго. ABC отлично работает для функции Растригина, но вместо этого показывает слабые результаты для функции Розенброка. Это связано с тем, что функция Розенброка унимодальна и в нашем эксперименте имеет только два измерения. По идее, ABC должен лучше работать в больших размерностях [155]. Наша модификация в целом работает очень хорошо, за исключением функции Растригина: глобальный экстремум достигался только 48 раз из 100 запусков. Это происходит потому, что в нашей модификации отсутствует понятие "глобального поиска", как в SBA; таким образом, результат алгоритма сильно зависит от начального распределения пчел-разведчиков. Можно сделать вывод, что наш алгоритм MBC плохо работает в условиях, когда много локальных экстремумов. Дополнительно стоит обратить внимание на функцию Химмельблау. В нашем алгоритме больше NFE(количества запусков прямой задачи), чем ABC. Это объясняется тем, что все 4 экстремума функции Химмельблау являются глобальными и равными 0. Алгоритму ABC нужно найти только один из них, а наш MBC сделан для поиска всех экстремумов.

	Standard Bees Algorithm		Artificial Bee Colony		Modified Bee Colony	
Функция	**Успех**	**NFE (среднее)**	**Успех**	**NFE (среднее)**	**Успех**	**NFE (среднее)**
Шекель	100%	3646	100%	2582	100%	502
Розенброк	100%	3850	100%	40496	100%	2351
Химмельблау	100%	4352	100%	1431	100%	2007
Растригин	100%	11,220	100%	2806	48%	4274

Таблица 4.5: Статистическое сравнение между SBA, ABC и MBC.

Функция	ne	nb	ngh	δ	ns	nre	nrb	$stlim$
Шекель	1	2	{1, 1}	5	50	20	10	5
Розенброк	1	2	{0.4, 0.4}	4	50	20	10	5
Химмельблау	1	2	{0.4, 0.4}	4	50	20	10	5
Растригин	1	2	{0.2, 0.2}	1	50	20	10	5

Таблица 4.6: Параметры SBA.

Функция	**SN**	**D**	**Limit**
Шекель	10	2	20
Розенброк	10	2	20
Химмельблау	10	2	20
Растригин	10	2	20

Таблица 4.7: Параметры алгоритма ABC.

Функция	n	m	d	δ	sb	abb	abp	τ	ε_1	ε_2
Шекель	1	2	{1, 1}	5	150	20	10	5	10^{-5}	10^{-3}
Розенброк	1	2	{0.4, 0.4}	4	150	20	10	5	10^{-8}	10^{-3}
Химмельблау	4	0	{0.4, 0.4}	4	250	20	10	5	10^{-5}	10^{-4}
Растригин	1	0	{1, 1}	1	500	20	10	5	10^{-8}	10^{-8}

Таблица 4.8: Параметры алгоритма MBC.

4.2 Идентификация параметров

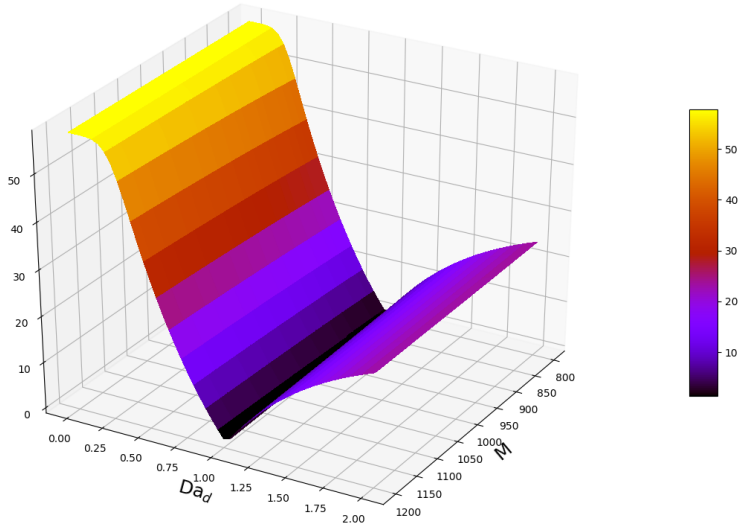
Рассмотрим обратную задачу определения неизвестных параметров на изотерме Ленгмюра (1.27). Функционал квадрата разности между вычисленными и "измеренными"кривыми прорыва, заданный выражением:

$$J(\mathrm{Da}_a, \mathrm{Da}_d, \mathrm{M}) = \int_0^T (c_{out}(t) - \widehat{c(t)})^2 dt,$$

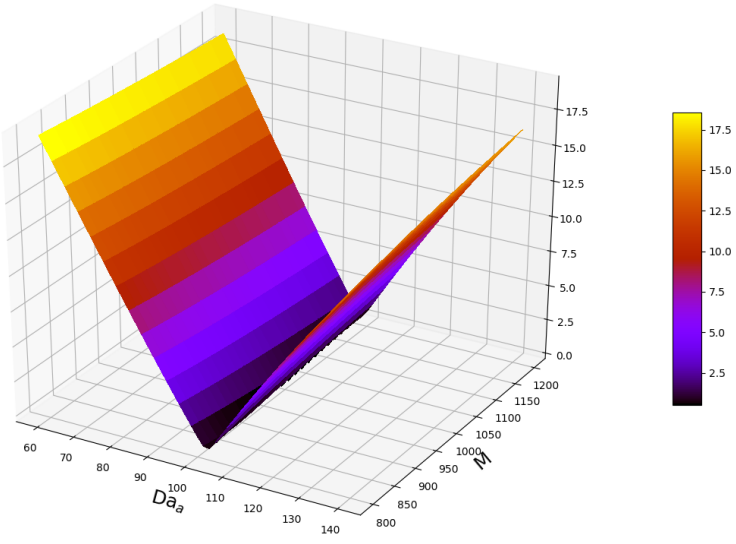
должен быть минимизирован. Здесь $\widehat{c(t)}$ - кривая прорыва из "измерений". На самом деле эта кривая получается путем решения прямой задачи с использованием выбранного набора параметров, которые ниже будут называться "точными параметрами". $\mathrm{Pe} = 10, \mathrm{Da}_a = 100, \mathrm{Da}_d = 1$, и $\mathrm{M} = 1000$ (см. уравнение изотермы Ленгмюра (1.27)) выбраны как точные значения в этом исследовании. Они используются для получения "кривой прорыва измерения". Эти параметры соответствуют случаю преобладающей реакции.

Принимая во внимание представленные здесь исследования сходимости по шагам по пространству и времени, было принято решение использовать сетку конечных элементов с 4760 узлами в расчетной области, а также с шагом по времени $\tau = 30$.

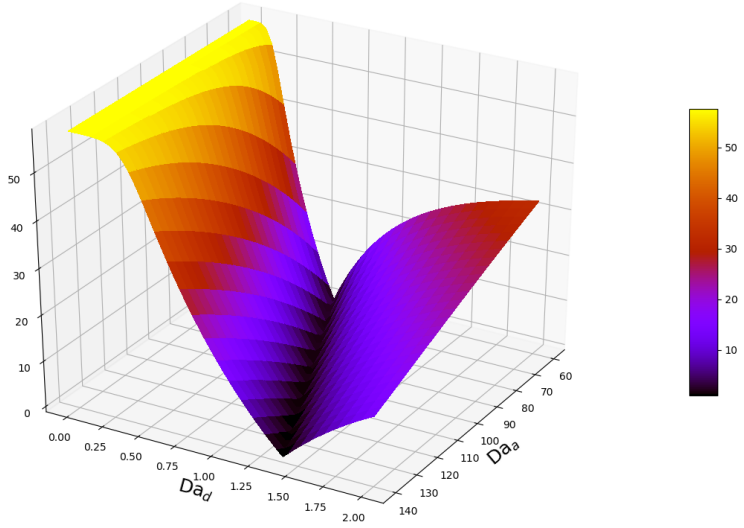
Функционал (2.1) показан на рисунке 4.9. Для лучшей наглядности показаны три цифры. На каждом из них фиксируется один из трех параметров $\mathrm{Da}_a, \mathrm{Da}_d, \mathrm{M}$, и строится функционал от двух других. Видно, что это невыпуклый функционал, причем низкие значения функционала располагаются в узкой долине с крутыми берегами. Один из берегов долины вогнутый, а второй выпуклый, что затрудняет идентификацию параметров.



а)



б)



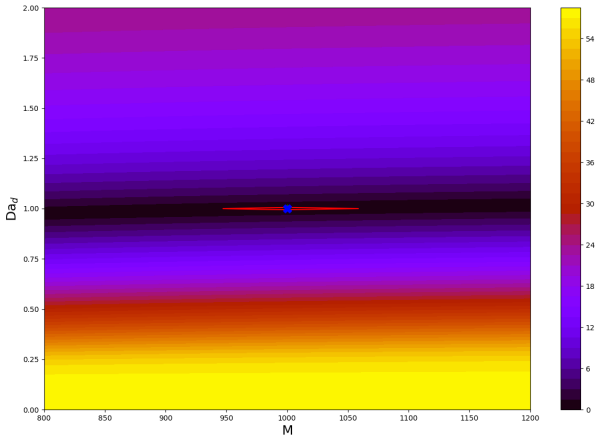
в)

Рисунок 4.9: 3D-графики для фиксированных: а) Da_a, б) Da_d, в) M.

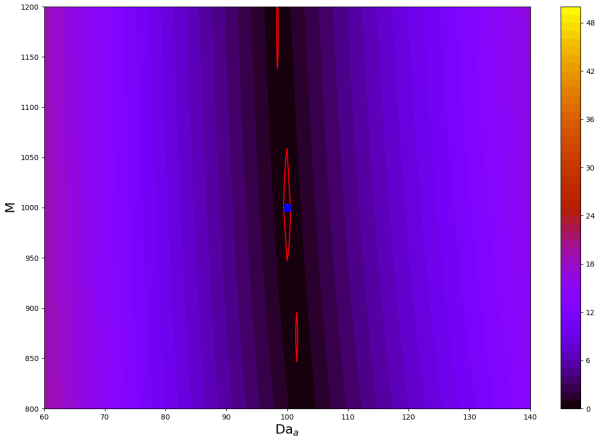
Напомним, что нас интересует решение определенного класса задач идентификации параметров. Основная цель состоит не в том, чтобы точно определить набор параметров, дающий минимум функционала. Основная цель состоит в том, чтобы выделить некоторые области параметров, для которых функционал меньше заданного порога. Такой класс задач идентификации параметров представляет интерес для некоторых отраслей. Кроме того, в зависимости от конкретной отрасли, разумный порог может составлять 1%, но также может составлять 20%.

4.3 Детерминированный подход

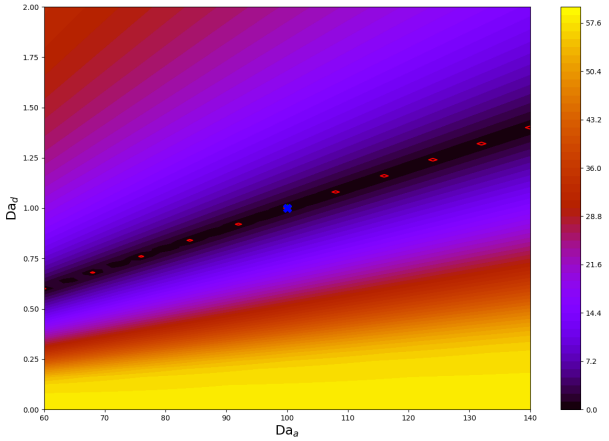
Наиболее простой подход к идентификации параметров состоит в том, чтобы рассмотреть равномерную сетку в соответствующей подобласти пространства параметров, вычислить прямую задачу и функционал для каждой точки сетки и отслеживать функционал для нахождения минимума. Очевидно, что это очень неэффективный способ определения параметров, потому что он требует большого количества решений прямой задачи. Тем не менее, это надежный способ получить эталонное решение. Этот подход представлен здесь для сравнения. Параметры будем искать в подобласти $60 \leq Da_a \leq 140$, $0 \leq Da_d \leq 2$, $800 \leq M \leq 1200$. В этой подобласти введена равномерная сетка $50 \times 50 \times 50$. Для каждой точки сетки решается прямая задача и вычисляется функционал (2.1). Результаты вычислений показаны на Рис. 4.10. Синяя звездочка обозначает точные параметры, а красный контур — допустимый набор, который определяется следующим образом:



а)



б)



в)

Рисунок 4.10: Графики для фиксированных: а) Da_a, б) Da_d, в) M.

$$J(\mathrm{Da}_a, \mathrm{Da}_d, \mathrm{M}) \leq 0.0246 \tag{4.2}$$

Красные контуры обводят допустимый набор параметров, такой, что для всех параметров из допустимого набора функционал меньше заданного порога. Легко видеть, что допустимое множество хорошо захватывает узкую долину с крутыми берегами, в пределах которой наблюдаются наименьшие значения функционала.

4.4 Эвристический подход

Сходимость МВС, как и сходимость любого алгоритма ВА, зависит от параметров алгоритма. Чтобы проиллюстрировать эту зависимость и в то же время показать, что алгоритм сходится для различных наборов параметров, МВС запускается здесь с двумя наборами параметров. Некоторые параметры одинаковы для обоих прогонов: $n = 2$, $d_x = 6$, $d_y = 0.06$, $d_z = 20$, $\delta = 1$, $abb = 50$, $\tau = 5, \varepsilon_1 = 10^{-8}$, $\varepsilon_2 = 1$. Параметры, которые различаются в двух прогонах, равны

I: $m = 3$, $sb = 20$, $abb = 50$, $abp = 20$;

II: $m = 5$, $sb = 200$, $abb = 50$, $abp = 40$.

Подобласть, в которой ищутся параметры реакции, выбирается такой же, как и в детерминированном случае выше. А именно, ось X — параметр $\mathrm{Da}_a \in [60, 140]$, ось Y — параметр $\mathrm{Da}_d \in [0, 2]$, Ось Z — параметр $\mathrm{M} \in [800, 1200]$.

Пять лучших идентифицированных точек и их функциональные значения вместе с количеством итераций и количеством прямых решений сведены в таблицу 4.9. Полезно также сравнить относительную погрешность вычисления функционала (сам функционал дает абсолютную погрешность). Относительная ошибка рассчитывается следующим образом:

$$\mathcal{E}_{rel} = \frac{\|c_{out} - \widehat{c_{out}}\|_2}{\|\widehat{c_{out}}\|_2} = \frac{\sqrt{\sum_{i=0}^{Nt}(c_i - \widehat{c_i})^2}}{\sqrt{\sum_{i=0}^{Nt}\widehat{c_i}^2}}, \tag{4.3}$$

где Nt — количество временных интервалов, а $\widehat{c_{out}}$ — выбранное точное решение (имитирующее данные экспериментов). Относительная ошибка указана в третьем столбце таблицы 4.9.

Видно, что для обоих наборов параметров МВС выделяются параметры изотермы Ленгмюра, дающие очень низкие значения функционала. Второй набор параметров МВС дает лучшие результаты за счет более дорогих вычислений. Вычисленная относительная ошибка составляет менее 1% для 5 выбранных точек из первого запуска МВС и менее 0.02% для второго запуска соответственно.

Другим важным наблюдением является то, что метод МВС хорошо приспособлен к основным целям работы, а именно к выявлению не только точных параметров реакции, но и идентификации наборов параметров реакции, для которых невязка принимает малые значения.

Трехмерная визуализация результатов показана на рисунках 4.11 и 4.12. На рисунках 4.11б и 4.12б показаны точки из подобласти параметров, которые исследуются МВС, а на рисунках 4.11а и 4.12а показаны только те точки, для которых функционал меньше выбранного порога.

Обратите внимание, что во многих промышленных задачах допускается гораздо более высокая ошибка. Если критерий останова ε_1 увеличить с $1e-8$ до $1e-3$ и использовать для МВС следующий набор параметров: $n = 1$, $m = 2$, $d_x = 6$, $d_y = 0.06$, $d_z = 20$, $\delta = 1$, $sb = 20$, $abb = 20$, $abp = 5$, $\tau = 3, \varepsilon_1 = 10^{-3}$, $\varepsilon_2 = 1$ получены следующие результаты; см. Таблицу 4.10.

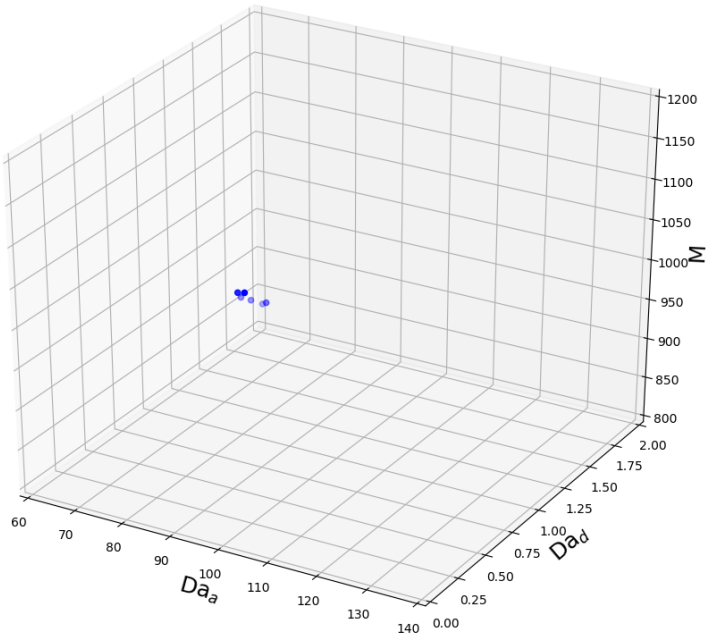
Набор параметров I			
Вывод программы	**Погрешность (%)**	**Итерации**	**NFE**
J(84.554, 0.845, 995.593) = 0.002	0.016		
J(112.266, 1.126, 1029.347) = 0.031	0.056		
J(100.455, 1.001, 964.319) = 0.0477	0.08	94	2230
J(116.173, 1.17, 1078.88) = 0.085	0.15		
J(91.394, 0.928, 1200.789) = 0.213	0.374		
Набор параметров II			
Вывод программы	**Погрешность (%)**	**Итерации**	**NFE**
J(92.794, 0.928, 997.607) = 1.29×10^{-3}	0.002		
J(83.358, 0.833, 994.812) = 3.01×10^{-3}	0.003		
J(101.655, 1.017, 1000.054) = 4.2×10^{-3}	0.007	281	12,300
J(136.404, 1.367, 1011.473) = 5.7×10^{-3}	0.01		
J(117.636, 1.178, 1014.271) = 0.011	0.02		

Таблица 4.9: Результаты для случая доминирующей реакции.

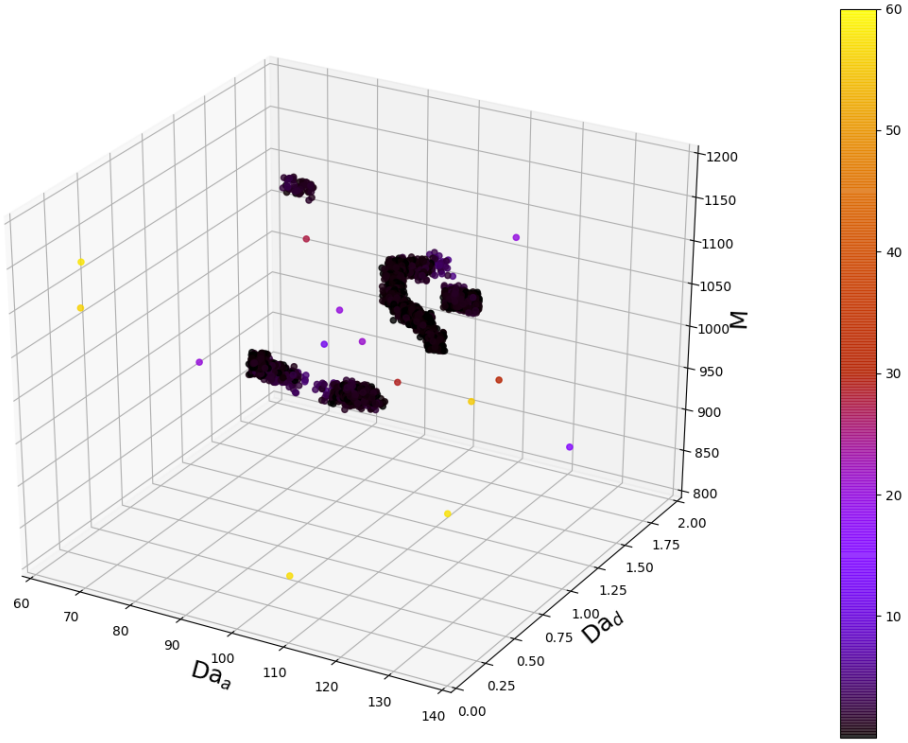
Вывод программы	**Погрешность (%)**	**Итерации**	**NFE**
J(126.11, 1.287, 1151.449) = 0.362	0.626		
J(104.861, 1.038, 991.051) = 0.405	0.7	16	205
J(117.213, 1.146, 927.115) = 0.654	1.133		

Таблица 4.10: Результаты для повышенных критериев остановки.

Примечательно, что не только определяется разумный допустимый набор параметров, но и точно вычисляется глобальный минимум. А именно, путем сравнения выявленного глобального минимума (126,11, 1,287, 1151,449) с точными параметрами (100, 1, 1000) получается относительная ошибка 0.626%.

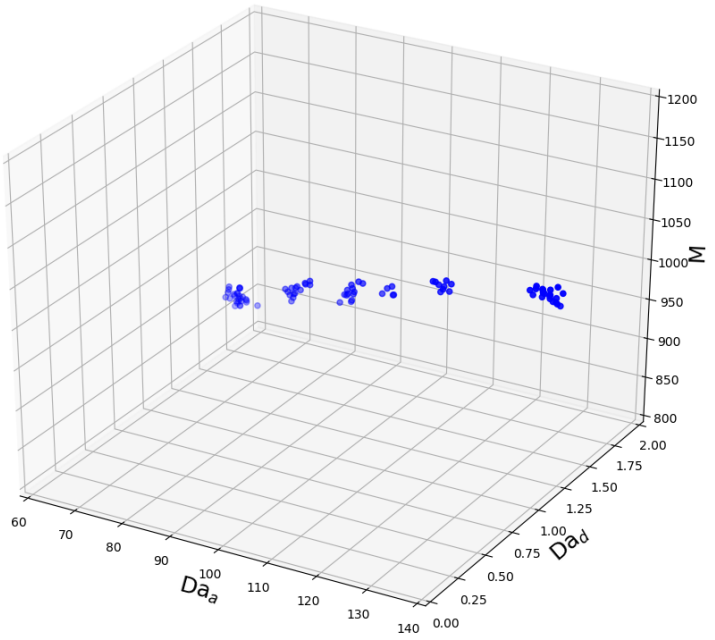


а)

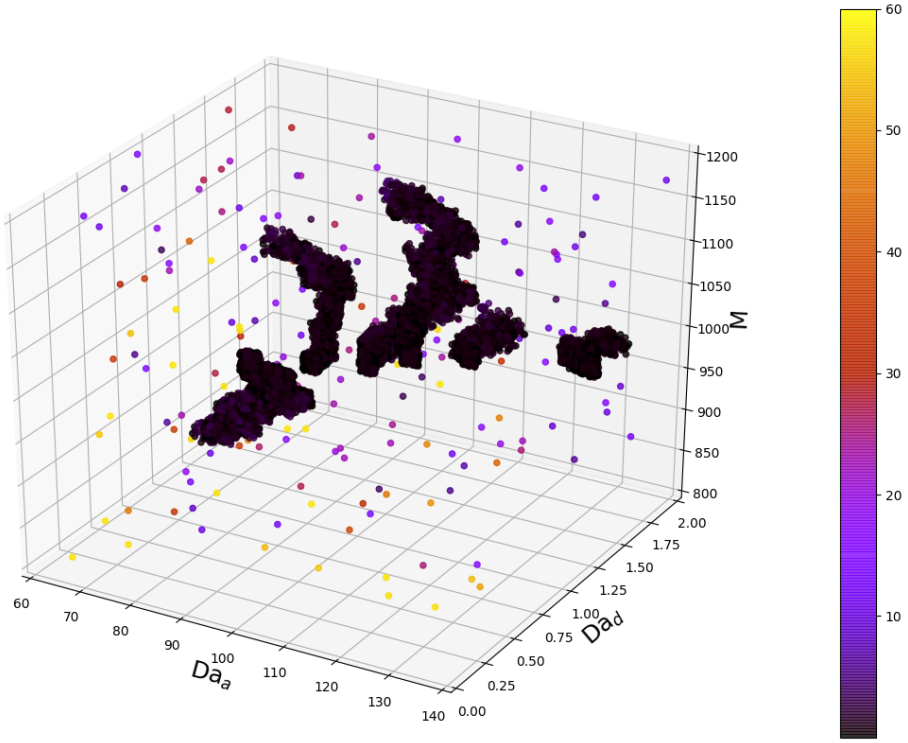


б)

Рисунок 4.11: Результаты алгоритма для набора параметров I: а) ниже порога (4.2), б) функционал (2.1).



а)



б)

Рисунок 4.12: Результаты алгоритма для набора параметров II: а) ниже порога (4.2), б) функционал (2.1).

4.5 Случай доминирующей диффузии

Тем не менее, несмотря на то, что вся глава направлена на изучение случая с преобладанием реакции, мы хотим провести небольшой анализ случая с преобладанием диффузии. Подробнее этот вопрос обсуждается в наших статьях [22, 128] и предыдущих разделах. Напомним ключевые моменты этого рассмотрения. Мы исследовали случай преобладания диффузии (см. Рис. 4.13), когда скорости реакции были небольшими, поэтому было мало временных слоев: $T = 40$ в безразмерном времени, малый временной шаг $\tau = 0.1$. Мы реализовали множество различных методов идентификации параметров, таких как детерминированный подход, стохастическая идентификация параметров и многоступенчатая идентификация параметров.

В этом разделе мы показываем результаты алгоритма для случая преобладания диффузии и изотермы Генри. Пусть X ось — параметр $\mathrm{Da}_a = [0, 0.01]$, Y ось — параметр $\mathrm{Da}_d = [0, 0.1]$. Точные параметры, которые мы постараемся определить: $\mathrm{Da}_a = 0.005$, $\mathrm{Da}_d = 0.05$. Алгоритм был запущен со следующими параметрами: $n = 2$, $m = 3$, $d_x = 0.0002, d_y = 0.002$, $\delta = 0.002$, $sb = 20$, $abb = 20$, $abp = 10$, $\tau = 3$.

Мы получили следующие результаты:

J(0.0050001, 0.049995) = 2.79961e-05

J(0.0050081, 0.050061) = 0.000768

J(0.0050086, 0.049906) = 0.000947

J(0.0049929, 0.049853) = 0.001008

J(0.0050096, 0.050515) = 0.002408

NFE: 1720

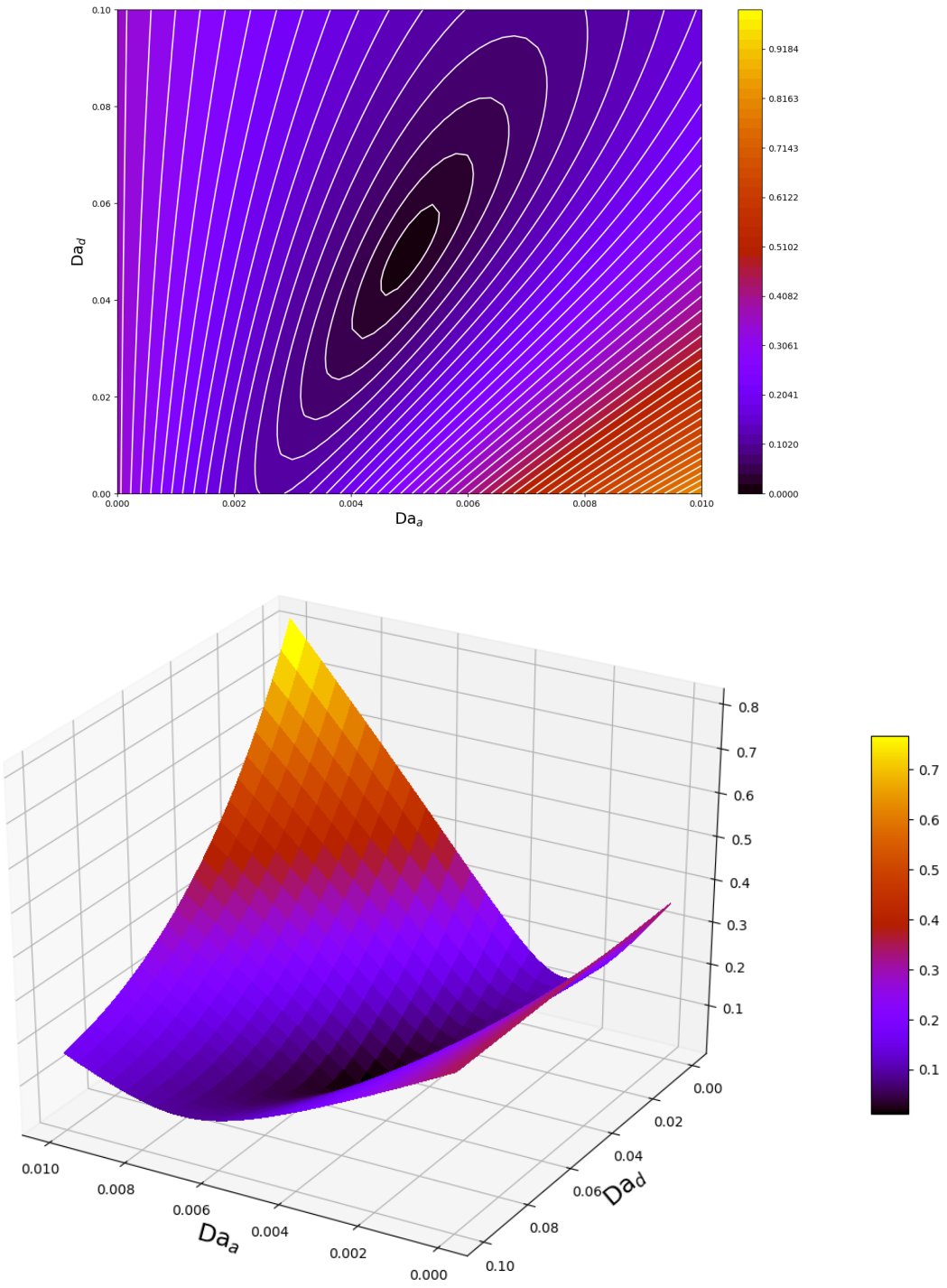


Рисунок 4.13: Случай доминирующей диффузии

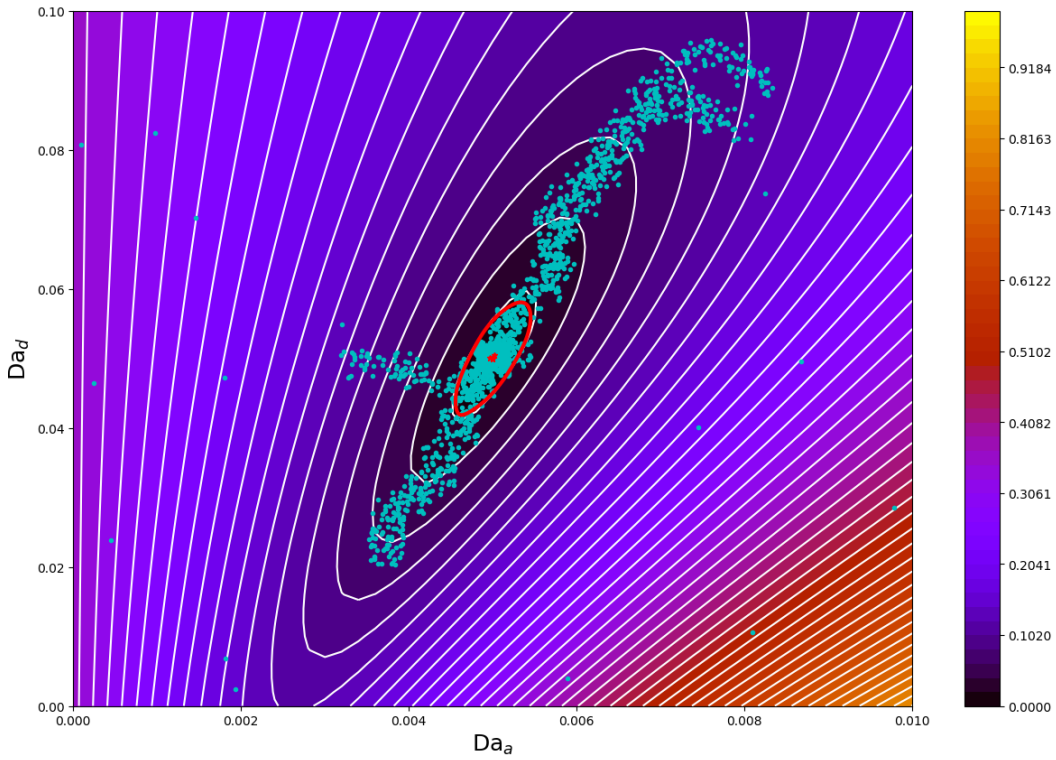


Рисунок 4.14: 2 лучших и 3 перспективные локации.

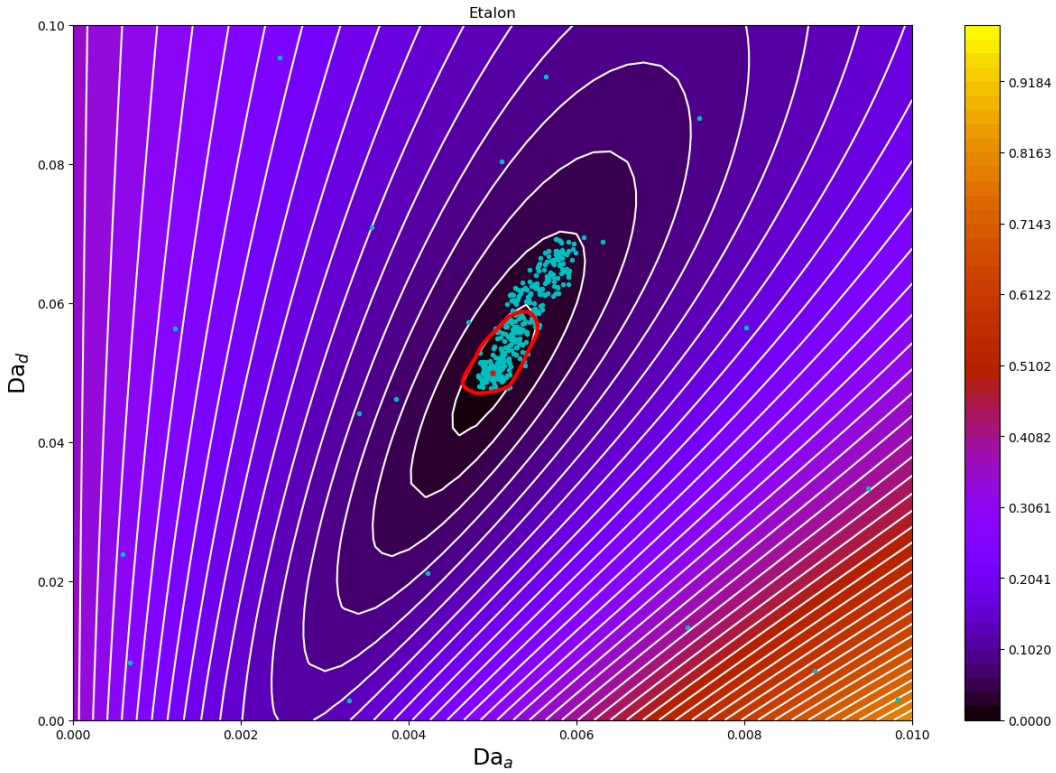


Рисунок 4.15: 1 лучшая локация.

Для этого случая мы специально взяли 2 лучших локации и 3 перспективных, чтобы показать, как все пчелиные семьи сходятся в одной точке. Как видно на Рис. 4.14, все пчелы слились в одну точку. Количество прямых оценок проблем также не так велико. В этом случае функционал, который у нас есть, имеет хорошую гладкую форму, и у нас есть только один глобальный экстремум. Если у нас есть такая априорная информация о функционале, то мы можем запустить наш алгоритм с условием, что есть только 1 лучшее местоположение и 0 перспективных местоположений, остальные параметры такие же. Для 1 лучшего места мы получили следующий результат:

J(0.0050001, 0.0499864) = 6.4601e-05

NFE: 220

Алгоритм дает нам точные координаты экстремума при существенно небольшом количестве прямых решений задачи (см. Рис. 4.15). При этом теперь это больше похоже на многоступенчатую идентификацию параметров.

4.6 Выводы

Разработан Модифицированный алгоритм пчелиной колонии (MBC) для идентификации неизвестных скоростей адсорбции и десорбции на изотерме Ленгмюра для случая доминирующей реакции и на изотерме Генри для случая доминирующей диффузии. Проведены тестовые запуски алгоритма для оценки эффективности на известных бенчмарк функциях. На основании полученных результатов можно сделать вывод, что предложенный алгоритм MBC способен быстро и точно находить все экстремумы в случае умеренного количества экстремумов. Из-за шумов с большой дисперсией в экспериментальных данных, функционал невязки может иметь локальные экстремумы, и в этом случае надо знать и их местоположение, что алгоритм MBC может обеспечить. Были также проведены статистические исследования по сравнению предложенной модификации с оригинальным алгоритмом SBA и более популярным ABC алгоритмом

на 100 независимых прогонах для каждой из бенчмарк функций. Проведенные исследования показали, что предложенная модификация прекрасно находит экстремум за минимальное количество NFE (запусков прямой задачи) по сравнению с SBA и ABC, что безусловно дает преимущество для его применения в дорогостоящих задачах. Единственным минусом можно считать то, что алгоритм плохо работает в мульти-экстремальных функционалах (смотрите результаты на функции Растригина в Таблице 4.5), поскольку много пчел заканчивает работу на локальных экстремумах. Следовательно, чтобы увеличить шанс нахождения глобального экстремума, необходимо увеличить количество локальных областей, что может существенно увеличить количество NFE. Что еще более важно, показано, что MBC можно использовать для идентификации параметров для важного класса задач. Определены допустимые наборы неизвестных параметров на изотермах Ленгмюра в случае реактивного течения в поровом масштабе с преобладанием реакции. Задача идентификации параметров для этого режима связана с минимизацией невыпуклого функционала, характеризующегося узкой долиной с крутыми берегами, относительно плоскости вблизи минимума.

Заключение

В работе разработаны ключевые элементы вычислительной технологии идентификации параметров поверхностной реакции в реагирующих потоках в масштабе пор.

Заявленная цель исследования достигнута решением следующих задач:

- Реализована двумерная математическая модель прямой задачи реагирующего потока в пористых средах. Модель включает стационарные уравнения Стокса и уравнение конвекции-диффузии, дополненное граничными условиями третьего рода, учитывающими адсорбцию и десорбцию. Рассмотрены две изотермы описывающие кинетику реакции: Ленгмюра для доминирующей реакции и Генри для доминирующей диффузии. Указаны основные безразмерные параметры. Подход применим для широкого диапазона микрогеометрий и параметров процесса. Численное решение гидродинамических процессов основано на треугольных сетках и МКЭ с элементами Тейлора—Худа. Проведены исследования влияния вычислительных параметров дискретизации по пространству и времени. Создано и зарегистрировано в Роспатенте программное обеспечение для создания вычислительных сеток синтетических пористых сред;
- Разработаны детерминированные и стохастические, одноступенчатые и многоступенчатые алгоритмы для идентификации неизвестных скоростей адсорбции и десорбции на изотерме Генри в сочетании с моделированием реагирующего потока в масштабе пор. Учитываются точные и зашумленные данные. В последнем случае обсуждается их влияние на процедуру идентификации. Показана роль стохастичности в шуме, путем проведения процедуры Монте-Карло на 10 разных реализациях шума;
- Выполнено определение скоростей поверхностных реакций в переносе раствора в пористой среде с использованием выборки метода Монте-

Карло на цепях Маркова в рамках байесовского подхода. Реализованы алгоритмы Метрополиса-Гастингса и Адаптивного Метрополиса. Проведены сравнения между двумя алгоритмами через функции автокорреляции. Доверительные интервалы были построены на основе апостериорных распределений для обоих алгоритмов. Исследовано влияние шума на измерениях для байесовской процедуры оценки. Количество экспериментальных данных было увеличено до десяти для обоих алгоритмов, чтобы сузить доверительный интервал. Анализ выборки с использованием автокорреляционной функции и уровня приема выполняется для оценки смешения цепи Маркова;

- Предложен и реализован Модифицированный алгоритм пчелиной колонии (MBC) как модификация стандартного алгоритма пчелиной колонии для идентификации неизвестных скоростей адсорбции и десорбции на изотерме Ленгмюра для случая доминирующей реакции и на изотерме Генри для случая доминирующей диффузии. Были проведены тестовые запуски алгоритма для оценки эффективности на известных бенчмарк функциях. Были также проведены статистические исследования по сравнению предложенной модификации с оригинальным Стандартным пчелиным алгоритмом (SBA) и более популярным алгоритмом Искусственной пчелиной колонии (ABC) на 100 независимых прогонах для каждой из бенчмарк функций. На основании полученных результатов можно сделать вывод, что предложенный алгоритм MBC способен быстро и точно находить все экстремумы в случае умеренного количества экстремумов. Численные эксперименты показали, что алгоритмы пчелиных колоний могут быть эффективно использованы для решения мультимодальных инженерных задач с высокой размерностью.

Литература

1. Wu G., More K. L., Johnston C. M. и др. High-performance electrocatalysts for oxygen reduction derived from polyaniline, iron, and cobalt // Science. — 2011. — Т. 332, № 6028. — С. 443–447.

2. Wang W., Luo Q., Li B. и др. Recent progress in redox flow battery research and development // Advanced Functional Materials. — 2013. — Т. 23, № 8. — С. 970–986.

3. Farajzadeh R., Andrianov A., Krastev R. и др. Foam-oil interaction in porous media: Implications for foam assisted enhanced oil recovery // SPE EOR Conference at Oil and Gas West Asia / OnePetro. — 2012.

4. Shukla R., Ranjith P., Haque A. и др. A review of studies on CO2 sequestration and caprock integrity // Fuel. — 2010. — Т. 89, № 10. — С. 2651–2664.

5. Zhao C. Y. Review on thermal transport in high porosity cellular metal foams with open cells // International Journal of Heat and Mass Transfer. — 2012. — Т. 55, № 13-14. — С. 3618–3632.

6. Zhu C., Han T., Duoss E. B. и др. Highly compressible 3D periodic graphene aerogel microlattices // Nature communications. — 2015. — Т. 6, № 1. — С. 1–8.

7. Noorman S., van Sint Annaland M., Kuipers H. Packed bed reactor technology for chemical-looping combustion // Industrial & Engineering Chemistry Research. — 2007. — Т. 46, № 12. — С. 4212–4220.

8. Wang Z., Zhao C., Pan Z. Porous bead-on-string poly (lactic acid) fibrous membranes for air filtration // Journal of Colloid and Interface Science. — 2015. — Т. 441. — С. 121–129.

9. Albanese A., Tang P. S., Chan W. C. The effect of nanoparticle size, shape, and surface chemistry on biological systems // Annual review of biomedical engineering. — 2012. — T. 14. — C. 1–16.

10. Muskat M. The flow of homogeneous fluids through porous media // Soil Science. — 1938. — T. 46, № 2. — C. 169.

11. Bear J. Dynamics of Fluids in Porous Media. — Courier Corporation, 2013.

12. Dullien F. Porous media: fluid transport and pore structure. — Academic press, 2012.

13. Chen L., He A., Zhao J. и др. Pore-scale modeling of complex transport phenomena in porous media // Progress in Energy and Combustion Science. — 2022. — T. 88. — C. 100968.

14. Carrillo F. J., Bourg I. C., Soulaine C. Multiphase flow modeling in multiscale porous media: An open-source micro-continuum approach // Journal of Computational Physics: X. — 2020. — T. 8. — C. 100073.

15. Iliev O., Laptev V. On numerical simulation of flow through oil filters // Computing and Visualization in Science. — 2004. — T. 6, № 2. — C. 139–146.

16. Zakharov P. E., Sivtsev P. V. Numerical calculation of the effective coefficient in the problem of linear elasticity of a composite material // Mathematical notes of NEFU. — 2017. — T. 24, № 2. — C. 75–84.

17. Vidotto E., Koch T., Koppl T. и др. Hybrid models for simulating blood flow in microvascular networks // Multiscale Modeling & Simulation. — 2019. — T. 17, № 3. — C. 1076–1102.

18. Sawade K., Peter C. Multiscale simulations of protein and membrane systems // Current Opinion in Structural Biology. — 2022. — T. 72. — C. 203–208.

19. Chi Z., Beile L., Deyu L. и др. Application of multiscale coupling models in the numerical study of circulation system // Medicine in Novel Technology and Devices. — 2022. — Т. 14. — С. 100117.

20. Zhou X., Qian S., Wang N. и др. A review on stochastic multiscale analysis for FRP composite structures // Composite Structures. — 2022. — Т. 284. — С. 115132.

21. Kundu P., Kumar V., Mishra I. M. Experimental and numerical investigation of fluid flow hydrodynamics in porous media: Characterization of pre-Darcy, Darcy and non-Darcy flow regimes // Powder Technology. — 2016. — Т. 303. — С. 278–291.

22. Grigoriev V. V., Iliev O., Vabishchevich P. N. Computational identification of adsorption and desorption parameters for pore scale transport in periodic porous media // Journal of Computational and Applied Mathematics. — 2020. — Т. 370. — С. 112661.

23. Колдоба А.В., Повещенко Ю.А., Самарская Е.А. и др. Методы математического моделирования окружающей среды. — Москва: «Наука», 2000.

24. Li P., Cai M. Challenges and new insights for exploitation of deep underground metal mineral resources // Transactions of Nonferrous Metals Society of China. — 2021. — Т. 31, № 11. — С. 3478–3505.

25. Huang S., Yang Y., Yang L. и др. New method for evaluation of fluid interface movement in oil reservoir with gas cap and weak aquifer // Journal of Petroleum Science and Engineering. — 2020. — Т. 185. — С. 106571.

26. Helmig R. Multiphase flow and transport processes in the subsurface: a contribution to the modeling of hydrosystems. — Springer-Verlag, 1997.

27. Bultreys T., Lin Q., Gao Y. и др. Validation of model predictions of pore-scale fluid distributions during two-phase flow // Physical Review E. — 2018. — Т. 97, № 5. — С. 053104.

28. Liu H., Valocchi A. J., Werth C. и др. Pore-scale simulation of liquid CO2 displacement of water using a two-phase lattice Boltzmann model // Advances in water resources. — 2014. — Т. 73. — С. 144–158.

29. Myers R. The basics of chemistry. — Greenwood Publishing Group, 2003.

30. Rao S.N. Chapter 5 - Adsorption // Self-Assembly Processes at Interfaces / Под ред. V. Ball. — Elsevier, 2018. — Т. 21 из Interface Science and Technology. — С. 251–331.

31. Ma Y. Z., Sobernheim D., Garzon J. R. Chapter 19 - Glossary for Unconventional Oil and Gas Resource Evaluation and Development // Unconventional Oil and Gas Resources Handbook / Под ред. Y. Z. Ma, S. A. Holditch. — Boston : Gulf Professional Publishing, 2016. — С. 513–526.

32. Mokhena T.C., Matabola K.P., Mokhothu T.H. и др. Electrospun carbon nanofibres: Preparation, characterization and application for adsorption of pollutants from water and air // Separation and Purification Technology. — 2022. — Т. 288. — С. 120666.

33. Zhao M., Ma D., Ye Y. Adsorption, separation and recovery properties of blocky zeolite-biochar composites for remediation of cadmium contaminated soil // Chinese Journal of Chemical Engineering. — 2021.

34. Plachá M., Kočí P., Isoz M. и др. Pore-scale filtration model for coated catalytic filters in automotive exhaust gas aftertreatment // Chemical Engineering Science. — 2020. — Т. 226. — С. 115854.

35. Kočí P., Isoz M., Plachá M. и др. 3D reconstruction and pore-scale modeling of coated catalytic filters for automotive exhaust gas aftertreatment // Catalysis Today. — 2019. — Т. 320. — С. 165–174. — SI:Vehicle Emissions Catalys.

36. Wang K., Zhang D., Mei N. и др. Inhibition effect of adsorption on brine pockets formation during seawater freeze desalination // Desalination. — 2022. — Т. 526. — С. 115507.

37. Lofrano G., Carotenuto M., Libralato G и др. Polymer functionalized nanocomposites for metals removal from water and wastewater: An overview // Water Research. — 2016. — Т. 92. — С. 22–37.

38. Whitaker S. The equations of motion in porous media // Chemical Engineering Science. — 1966. — Т. 21, № 3. — С. 291–300.

39. Slattery J. C. Single-phase flow through porous media // AIChE Journal. — 1969. — Т. 15, № 6. — С. 866–872.

40. Lundgren T. S. Slow flow through stationary random beds and suspensions of spheres // Journal of fluid mechanics. — 1972. — Т. 51, № 2. — С. 273–299.

41. Bachmat Y., Bear J. Macroscopic modelling of transport phenomena in porous media. 1: The continuum approach // Transport in porous media. — 1986. — Т. 1, № 3. — С. 213–240.

42. Whitaker S. Flow in porous media I: A theoretical derivation of Darcy’s law // Transport in porous media. — 1986. — Т. 1, № 1. — С. 3–25.

43. Du Plessis J. P., Masliyah J. H. Mathematical modelling of flow through consolidated isotropic porous media // Transport in Porous Media. — 1988. — Т. 3, № 2. — С. 145–161.

44. Du Plessis J. P., Masliyah J. H. Flow through isotropic granular porous media // Transport in porous media. — 1991. — Т. 6, № 3. — С. 207–221.

45. Liu S., Masliyah J. H. Single fluid flow in porous media // Chemical Engineering Communications. — 1996. — Т. 148, № 1. — С. 653–732.

46. Chai Z., Shi B., Lu J. и др. Non-Darcy flow in disordered porous media: A lattice Boltzmann study // Computers & Fluids. — 2010. — Т. 39, № 10. — С. 2069–2077.

47. Porta G. M., Chaynikov S., Thovert J. и др. Numerical investigation of pore and continuum scale formulations of bimolecular reactive transport in porous media // Advances in water resources. — 2013. — Т. 62. — С. 243–253.

48. Kundu P., Kumar V., Hoarau Y. и др. Numerical simulation and analysis of fluid flow hydrodynamics through a structured array of circular cylinders forming porous medium // Applied Mathematical Modelling. — 2016. — Т. 40, № 23-24. — С. 9848–9871.

49. Bandara U. C., Tartakovsky A. M., Oostrom M. и др. Smoothed particle hydrodynamics pore-scale simulations of unstable immiscible flow in porous media // Advances in water resources. — 2013. — Т. 62. — С. 356–369.

50. Низьев В. Г., Колдоба А. В., Мирзаде Ф. Х. и др. Численное моделирование плавления двухкомпонентных порошков при лазерном спекании // Математическое моделирование. — 2011. — Т. 23, № 4. — С. 90–102.

51. Eidel B., Fischer A. The heterogeneous multiscale finite element method for the homogenization of linear elastic solids and a comparison with the FE2 method // Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. — 2018. — Т. 329. — С. 332–368.

52. Coenen E.W.C., Kouznetsova V.G., Geers M.G.D. Multi-scale continuous–discontinuous framework for computational-

homogenization–localization // Journal of the Mechanics and Physics of Solids. — 2012. — Т. 60, № 8. — С. 1486–1507.

53. Svenning E., Fagerström M., Larsson F. Computational homogenization of microfractured continua using weakly periodic boundary conditions // Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. — 2016. — Т. 299. — С. 1–21.

54. Svenning E., Larsson F., Fagerström M. A two-scale modeling framework for strain localization in solids: XFEM procedures and computational aspects // Computers & Structures. — 2019. — Т. 211. — С. 43–54.

55. Nguyen V. P., Stroeven M., Sluys L. J. An enhanced continuous–discontinuous multiscale method for modeling mode-I cohesive failure in random heterogeneous quasi-brittle materials // Engineering Fracture Mechanics. — 2012. — Т. 79. — С. 78–102.

56. Miehe C., Schröder J., Schotte J. Computational homogenization analysis in finite plasticity Simulation of texture development in polycrystalline materials // Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. — 1999. — Т. 171, № 3. — С. 387–418.

57. Geers M.G.D., Kouznetsova V.G., Brekelmans W.A.M. Multi-scale computational homogenization: Trends and challenges // Journal of Computational and Applied Mathematics. — 2010. — Т. 234, № 7. — С. 2175–2182. — Fourth International Conference on Advanced COmputational Methods in ENgineering (ACOMEN 2008).

58. Mozaffari Majd M, Kordzadeh-Kermani V., Ghalandari V. и др. Adsorption isotherm models: A comprehensive and systematic review (2010-2020) // Science of The Total Environment. — 2022. — Т. 812. — С. 151334.

59. Ma J., Wu K., Jiang Z. и др. SHIFT: An implementation for lattice Boltzmann simulation in low-porosity porous media // Physical Review E. — 2010. — Т. 81, № 5. — С. 056702.

60. Zheng W., Kim S. H. A multiscale approach to accelerate pore-scale simulation of porous electrodes // Journal of Power Sources. — 2017. — Т. 348. — С. 21–29.

61. Wei H., Zhao S., Rong Q. и др. Predicting the effective thermal conductivities of composite materials and porous media by machine learning methods // International Journal of Heat and Mass Transfer. — 2018. — Т. 127. — С. 908–916.

62. Wu H., Fang W., Kang Q. и др. Predicting effective diffusivity of porous media from images by deep learning // Scientific reports. — 2019. — Т. 9, № 1. — С. 1–12.

63. Shimura T., Jiao Z., Shikazono N. Evaluation of nickel-yttria stabilized zirconia anode degradation during discharge operation and redox cycles operation by electrochemical calculation // Journal of Power Sources. — 2016. — Т. 330. — С. 149–155.

64. Wartha E., Birkelbach F., Bösenhofer M. и др. Enhanced kinetic model identification for gas–solid reactions through Computational Fluid Dynamics // Chemical Engineering Journal. — 2022. — Т. 430. — С. 132850.

65. Колдоба А. В., Скалько Ю. И. Численное моделирование распространения прямоточных волн внутрипластового горения в инверсном режиме // Компьютерные исследования и моделирование. — 2020. — Т. 12, № 5. — С. 993–1006.

66. Flannery B. P., Deckman H. W., Roberge W. G. и др. Three-dimensional X-ray microtomography // Science. — 1987. — Т. 237, № 4821. — С. 1439–1444.

67. Curtis M. E. Structural characterization of gas shales on the micro-and nano-scales // Canadian unconventional resources and international petroleum conference / OnePetro. — 2010.

68. Lopez-Haro M., Guétaz L., Printemps T. и др. Three-dimensional analysis of Nafion layers in fuel cell electrodes // Nature communications. — 2014. — Т. 5, № 1. — С. 1–6.

69. Zenyuk I. V., Parkinson D. Y., Hwang G. и др. Probing water distribution in compressed fuel-cell gas-diffusion layers using X-ray computed tomography // Electrochemistry Communications. — 2015. — Т. 53. — С. 24–28.

70. Mosser L., Dubrule O., Blunt M. J. Reconstruction of three-dimensional porous media using generative adversarial neural networks // Physical Review E. — 2017. — Т. 96, № 4. — С. 043309.

71. Gavrilieva U., Vasilyeva M., Harris I. и др. Multiscale Finite Element Method for scattering problem in heterogeneous domain // Journal of Physics: Conference Series / IOP Publishing. — Т. 1392, 1. — 2019. — С. 012067.

72. Eymard R., Gallouët T., Herbin R. Finite volume methods // Solution of Equation in Rn (Part 3), Techniques of Scientific Computing (Part 3). — Elsevier, 2000. — Т. 7 из Handbook of Numerical Analysis. — С. 713–1018.

73. Brezzi F., Fortin M. Mixed and hybrid finite element methods. — Springer Science & Business Media, 2012. — Т. 15.

74. Reddy J. N. Introduction to the finite element method. — McGraw-Hill Education, 2019.

75. Zienkiewicz O. C., Taylor R. L., Zhu J. Z. The finite element method: its basis and fundamentals. — Elsevier, 2005.

76. Alnæs M. S., Blechta J., Hake J. и др. The FEniCS Project Version 1.5 // Archive of Numerical Software. — 2015. — Т. 3, № 100.

77. Hecht F. New development in freefem++ // Journal of Numerical Mathematics. — 2012. — Т. 20, № 3-4. — С. 251–266.

78. Geuzaine C., Remacle J.-F. Gmsh: a three-dimensional finite element mesh generator with built-in pre- and post-processing facilities // International Journal for Numerical Methods in Engineering. — 2009. — Т. 79, № 11. — С. 1309–1331.

79. Starostin N.P., Tikhonov R.S. Numerical solution of the inverse problem of thermal diagnostics of friction in a system of radial sliding bearings with an account of rotation of the shaft // Inverse Problems in Science and Engineering. — 2020. — Т. 28, № 5. — С. 662–673.

80. Becker R., Braack M., Vexler B. Numerical parameter estimation for chemical models in multidimensional reactive flows // Combustion Theory and Modelling. — 2004. — Т. 8, № 4. — С. 661.

81. Vasilyeva M., Alekseev V., Chung E. T. и др. Multiscale dimension reduction for flow and transport problems in thin domain with reactive boundaries // Journal of Computational Physics. — 2021. — Т. 442. — С. 110512.

82. Лаврентьев М. М., Романов В. Г., Шишатский С. П. Некорректные задачи математической физики и анализа. — Наука, 1980.

83. Алифанов О. М. Обратные задачи теплообмена. — 1988. — Т. 280. — С. 1.

84. Isakov V. Inverse problems for partial differential equations. — Springer, 2017.

85. Самарский А. А., Вабищевич П. Н. Численные методы решения обратных задач математической физики. — URSS, 2007.

86. Ильин А. И., Кабанихин С. И., Криворотько О. И. Об определении параметров моделей, описываемых системами нелинейных дифференциальных уравнений // Сибирские электронные математические известия. — 2014. — Т. 11, № 0. — С. 62–76.

87. Старостин Н.П., Тихонов Р.С. Моделирование теплового процесса и восстановление фрикционных тепловыделений в системе полимерных подшипников скольжения по температурным данным // Тепловые процессы в технике. — 2016. — № 3. — С. 137–144.

88. Sun N.-Z. Inverse problems in groundwater modeling. — Springer Science & Business Media, 2013. — Т. 6.

89. Q Yang., Zhong Y., Li X. и др. Adsorption-coupled reduction of bromate by Fe(II)–Al(III) layered double hydroxide in fixed-bed column: Experimental and breakthrough curves analysis // Journal of Industrial and Engineering Chemistry. — 2015. — Т. 28. — С. 54–59.

90. Gómez-Avilés A., Peñas-Garzón M., Belver C. и др. Equilibrium, kinetics and breakthrough curves of acetaminophen adsorption onto activated carbons from microwave-assisted FeCl3-activation of lignin // Separation and Purification Technology. — 2021. — Т. 278. — С. 119654.

91. Starostin N.P., Tikhonov R.S. Experimental Verification of the Efficiency of Thermal Diagnostics of Friction in a System of Sliding Bearings at Low Shaft Speeds // Journal of Engineering Physics and Thermophysics. — 2020. — Т. 93, № 3. — С. 519–526.

92. Wang Y., McDowell D. L. Uncertainty quantification in materials modeling //

Uncertainty Quantification in Multiscale Materials Modeling. — Elsevier, 2020. — С. 1–40.

93. Allmaras M., Bangerth W., Linhart J. M. и др. Estimating Parameters in Physical Models through Bayesian Inversion: A Complete Example // SIAM Review. — 2013. — Т. 55, № 1. — С. 149–167.

94. Vyazovkin S., Burnham A. K., Criado J. M. и др. ICTAC Kinetics Committee recommendations for performing kinetic computations on thermal analysis data // Thermochimica acta. — 2011. — Т. 520, № 1-2. — С. 1–19.

95. Vyazovkin S., Chrissafis K., Di Lorenzo M. L. и др. ICTAC Kinetics Committee recommendations for collecting experimental thermal analysis data for kinetic computations // Thermochimica acta. — 2014. — Т. 590. — С. 1–23.

96. Tarantola A. Inverse problem theory and methods for model parameter estimation. — SIAM, 2005.

97. Aster R. C., Borchers B., Thurber C. H. Parameter Estimation and Inverse Problems. — Elsevier, 2013.

98. Кабанихин С. И. Обратные и некорректные задачи. — Сибирское научное издательство, 2018.

99. Кабанихин С. И. Обратные задачи естествознания и компьютерное моделирование // Наука из первых рук. — 2013. — № 1 (49). — С. 32–43.

100. Арсенин В. Я., Тихонов А. Н. Методы решения некорректных задач. — М.: Наука, 1979. 9. Чередниченко В. Г., 1979.

101. Engl H. W., Groetsch C. W. Inverse and Ill-Posed problems. — Elsevier, 2014. — Т. 4.

102. Handbook of Global Optimization / Под ред. R. Horst, P. M. Pardalos. — Springer, 2013.

103. Nocedal J., Wright S. J. Numerical Optimization. — Springer, 2006.

104. Zhigljavsky A., Žilinskas A. Stochastic Global Optimization. — Springer, 2008.

105. Соболь И. М. Равномерно распределенные последовательности с дополнительным свойством равномерности // Журнал вычислительной математики и математической физики. — 1976. — Т. 16, № 5. — С. 1332–1337.

106. Sobol' I. M. On the systematic search in a hypercube // SIAM Journal on Numerical Analysis. — 1979. — Т. 16, № 5. — С. 790–793.

107. Соболь И. М., Статников Р. Б. Выбор оптимальных параметров в задачах со многими критериями. — Дрофа, 2006.

108. Ho Y. C., Lee R. A Bayesian approach to problems in stochastic estimation and control // IEEE transactions on automatic control. — 1964. — Т. 9, № 4. — С. 333–339.

109. Makowski D., Wallach D., Tremblay M. Using a Bayesian approach to parameter estimation; comparison of the GLUE and MCMC methods // Agronomie. — 2002. — Т. 22, № 2. — С. 191–203.

110. Linde N., Ginsbourger D., Irving J. и др. On uncertainty quantification in hydrogeology and hydrogeophysics // Advances in Water Resources. — 2017. — Т. 110. — С. 166–181.

111. Pacheo C. C., Dulikravich G. S., Vesenjak M. и др. Inverse parameter identification in solid mechanics using Bayesian statistics, response surfaces and minimization // Technische Mechanik. Scientific Journal for Fundamentals and Applications of Engineering Mechanics. — 2016. — Т. 36, № 1-2. — С. 120–131.

112. Bal G., Langmore I., Marzouk Y. Bayesian inverse problems with Monte Carlo forward models // Inverse Problems & Imaging. — 2013. — Т. 7, № 1. — С. 81.

113. Köpke C., Irving J., Roubinet D. Stochastic inversion for soil hydraulic parameters in the presence of model error: An example involving ground-penetrating radar monitoring of infiltration // Journal of Hydrology. — 2019. — Т. 569. — С. 829–843.

114. Van Ravenzwaaij D., Cassey P., Brown S. D. A simple introduction to Markov Chain Monte–Carlo sampling // Psychonomic bulletin & review. — 2018. — Т. 25, № 1. — С. 143–154.

115. Goldberg D. E. Genetic algorithms. — Pearson Education India, 2006.

116. Wei Y., Qiqiang L. Survey on particle swarm optimization algorithm [j] // Engineering Science. — 2004. — Vol. 5, no. 5. — P. 87–94.

117. Sette S., Boullart L. Genetic programming: principles and applications // Engineering applications of artificial intelligence. — 2001. — Т. 14, № 6. — С. 727–736.

118. Storn R., Price K. Differential evolution–a simple and efficient heuristic for global optimization over continuous spaces // Journal of global optimization. — 1997. — Т. 11, № 4. — С. 341–359.

119. Marques-Silva J. P., Sakallah K. A. GRASP: A search algorithm for propositional satisfiability // IEEE Transactions on Computers. — 1999. — Т. 48, № 5. — С. 506–521.

120. Najari S., Gróf G., Saeidi S. и др. Modeling and optimization of hydrogenation of CO2: Estimation of kinetic parameters via Artificial Bee Colony (ABC) and Differential Evolution (DE) algorithms // International Journal of Hydrogen Energy. — 2019. — Т. 44, № 10. — С. 4630–4649.

121. Yang J., Lu L., Ouyang W. и др. Estimation of kinetic parameters of an anaerobic digestion model using particle swarm optimization // Biochemical Engineering Journal. — 2017. — Т. 120. — С. 25–32.

122. Barbalho T. J., Santos A. C., Aloise D. J. Metaheuristics for the work-troops scheduling problem // International Transactions in Operational Research. — 2020.

123. Liu Q., Li X., Liu H. и др. Multi-objective metaheuristics for discrete optimization problems: A review of the state-of-the-art // Applied Soft Computing. — 2020. — Т. 93. — С. 106382.

124. Karimi-Mamaghan M., Mohammadi M., Meyer P. и др. Machine learning at the service of meta-heuristics for solving combinatorial optimization problems: A state-of-the-art // European Journal of Operational Research. — 2022. — Т. 296, № 2. — С. 393–422.

125. Franco-Sepúlveda G., Del Rio-Cuervo J. C., Pachón-Hernández M. A. State of the art about metaheuristics and artificial neural networks applied to open pit mining // Resources Policy. — 2019. — Т. 60. — С. 125–133.

126. Mehrabi M., Pradhan B., Moayedi H. и др. Optimizing an Adaptive Neuro-Fuzzy Inference System for Spatial Prediction of Landslide Susceptibility Using Four State-of-the-art Metaheuristic Techniques // Sensors. — 2020. — Т. 20, № 6.

127. Григорьев В. В., Саввин А. В., Вабищевич П. Н. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ "Программа для ЭВМ "Synthetic porosity by spherical particles". № 2021616253 от 02.04.2021. — 2021.

128. Grigoriev V. V., Iliev O., Vabishchevich P. N. Computational identification of

adsorption and desorption parameters for pore scale transport in random porous media // International Conference on Large-Scale Scientific Computing / Springer. — 2019. — С. 115–122.

129. Grigoriev V. V., Vabishchevich P. N. Bayesian Estimation of Adsorption and Desorption Parameters for Pore Scale Transport // Mathematics. — 2021. — Т. 9, № 16.

130. Grigoriev V. V., Iliev O., Vabishchevich P. N. On Parameter Identification for Reaction-Dominated Pore-Scale Reactive Transport Using Modified Bee Colony Algorithm // Algorithms. — 2022. — Т. 15, № 1.

131. Baronti L., Castellani M., Pham D. T. An analysis of the search mechanisms of the bees algorithm // Swarm and Evolutionary Computation. — 2020. — Т. 59. — С. 100746.

132. Acheson D. J. Elementary Fluid Dynamics. — Oxford : Clarendon Press, 2005.

133. Kralchevsky P. A., Danov K. D., Denkov N. D. Chemical physics of colloid systems and interfaces // Handbook of surface and colloid chemistry. — 1997. — Т. 2.

134. Gresho P. M., Sani R. L. Incompressible Flow and the Finite Element Method, Volume 2, Isothermal Laminar Flow. — New York : Wiley, 2000.

135. Ascher U. M. Numerical Methods for Evolutionary Differential Equations. — Society for Industrial and Applied Mathematics, 2008.

136. Taylor C., Hood P. A numerical solution of the Navier-Stokes equations using the finite element technique // Computers & Fluids. — 1973. — Т. 1, № 1. — С. 73–100.

137. Logg A., Mardal K.-A., Wells G. N. и др. Automated Solution of Differential Equations by the Finite Element Method. — Springer, 2012.

138. Hunter J. D. Matplotlib: A 2D graphics environment // Computing in Science & Engineering. — 2007. — T. 9, № 3. — C. 90–95.

139. Kern M. Numerical Methods for Inverse Problems. — Wiley, 2016.

140. Herman J., Usher W. SALib: An open-source Python library for Sensitivity Analysis // The Journal of Open Source Software. — 2017. — jan. — T. 2, № 9.

141. Maday Y., Anthony T., Penn J. D. и др. PBDW state estimation: Noisy observations; configuration-adaptive background spaces; physical interpretations // ESAIM: Proceedings and Surveys. — 2015. — T. 50. — C. 144–168.

142. Kuo H.-H. White Noise Distribution Theory. — CRC press, 1996. — Vol. 5.

143. Chen M.-H., Shao Q.-M. Monte Carlo estimation of Bayesian credible and HPD intervals // Journal of Computational and Graphical Statistics. — 1999. — T. 8, № 1. — C. 69–92.

144. Gamerman D., Lopes H. F. Markov Chain Monte Carlo: Stochastic Simulation for Bayesian Inference. — CRC Press, 2006.

145. Gilks W. R., Richardson S., Spiegelhalter D. J. Introducing Markov chain Monte // Markov chain Monte Carlo in practice. — 1995. — C. 1.

146. Roberts G. O., Rosenthal J. S. Examples of adaptive MCMC // Journal of Computational and Graphical Statistics. — 2009. — Vol. 18, no. 2. — P. 349–367.

147. Haario H., Saksman E., Tamminen J. и др. An adaptive Metropolis algorithm // Bernoulli. — 2001. — T. 7, № 2. — C. 223–242.

148. Roberts G. O., Gelman A., Gilks W. R. и др. Weak convergence and optimal scaling of random walk Metropolis algorithms // The annals of applied probability. — 1997. — Т. 7, № 1. — С. 110–120.

149. Pham D. T., Ghanbarzadeh A., Koc E. и др. The bees algorithm // Technical Note, Manufacturing Engineering Centre, Cardiff University, UK. — 2005.

150. Pham D. T., Ghanbarzadeh A., Koç E. и др. The bees algorithm—a novel tool for complex optimisation problems // Intelligent Production Machines and Systems. — Elsevier, 2006. — С. 454–459.

151. Hussein W. A., Sahran S., Abdullah S. The variants of the Bees Algorithm (BA): A survey // Artificial Intelligence Review. — 2017. — Т. 47, № 1. — С. 67–121.

152. Pham D. T., Castellani M. The bees algorithm: modelling foraging behaviour to solve continuous optimization problems // Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part C: Journal of Mechanical Engineering Science. — 2009. — Т. 223, № 12. — С. 2919–2938.

153. Pham D. T., Castellani M. Benchmarking and comparison of nature-inspired population-based continuous optimisation algorithms // Soft Computing. — 2014. — Т. 18, № 5. — С. 871–903.

154. Pham D. T., Castellani M. A comparative study of the Bees Algorithm as a tool for function optimisation // Cogent Engineering. — 2015. — Т. 2, № 1. — С. 1091540.

155. Karaboga D., Akay B. B. An artificial bee colony (abc) algorithm on training artificial neural networks (Technical Report TR06): Erciyes University, Engineering Faculty // Computer Engineering Department. — 2005.

156. Karaboga D., Basturk B. On the performance of artificial bee colony (ABC) algorithm // Applied soft computing. — 2008. — Т. 8, № 1. — С. 687–697.

157. Karaboga D., Akay B. A comparative study of artificial bee colony algorithm // Applied mathematics and computation. — 2009. — Т. 214, № 1. — С. 108–132.

158. Pham D. T., Castellani M., Le Thi H. A. Nature-inspired intelligent optimisation using the bees algorithm // Transactions on Computational Intelligence XIII. — Springer, 2014. — С. 38–69.

159. Pham D. T., Baronti L., Zhang B. и др. Optimisation of engineering systems with the bees algorithm // International Journal of Artificial Life Research (IJALR). — 2018. — Т. 8, № 1. — С. 1–15.

160. Frisch K. The role of dances in recruiting bees to familiar sites // Animal Behaviour. — 1968. — Т. 16, № 4. — С. 531–533.

161. Pham D. T., Castellani M., Fahmy A. A. Learning the inverse kinematics of a robot manipulator using the bees algorithm // 2008 6th IEEE International Conference on Industrial Informatics / IEEE. — 2008. — С. 493–498.

162. Packianather M. S., Landy M., Pham D. T. Enhancing the speed of the Bees Algorithm using Pheromone-based Recruitment // 2009 7th IEEE International Conference on Industrial Informatics / IEEE. — 2009. — С. 789–794.

163. Yuce B., Packianather M. S., Mastrocinque E. и др. Honey bees inspired optimization method: the bees algorithm // Insects. — 2013. — Т. 4, № 4. — С. 646–662.

164. Castellani M., Pham Q. T., Pham D. T. Dynamic optimisation by a modified bees algorithm // Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part I: Journal of Systems and Control Engineering. — 2012. — Vol. 226, no. 7. — P. 956–971.

165. Pham Q. T., Pham D. T., Castellani M. A modified bees algorithm and a statistics-based method for tuning its parameters // Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part I: Journal of Systems and Control Engineering. — 2012. — Т. 226, № 3. — С. 287–301.

166. Li J.-Q., Pan Q.-K., Tasgetiren M. F. A discrete artificial bee colony algorithm for the multi-objective flexible job-shop scheduling problem with maintenance activities // Applied Mathematical Modelling. — 2014. — Т. 38, № 3. — С. 1111–1132.

167. Vural R. A., Yildirim T., Kadioglu T. и др. Performance Evaluation of Evolutionary Algorithms for Optimal Filter Design // IEEE Transactions on Evolutionary Computation. — 2012. — Т. 16, № 1. — С. 135–147.

168. Bhandari A. K., Kumar A., Singh G. K. Modified artificial bee colony based computationally efficient multilevel thresholding for satellite image segmentation using Kapur's, Otsu and Tsallis functions // Expert Systems with Applications. — 2015. — Т. 42, № 3. — С. 1573–1601.

169. Li B., Li Y., Gong L. Protein secondary structure optimization using an improved artificial bee colony algorithm based on AB off-lattice model // Engineering Applications of Artificial Intelligence. — 2014. — Т. 27. — С. 70–79.

170. Shekel J. Test functions for multimodal search techniques // Fifth Annual Princeton Conf. on Information Science and Systems, 1971. — 1971.

171. Rosenbrock H. H. An automatic method for finding the greatest or least value of a function // The Computer Journal. — 1960. — Т. 3, № 3. — С. 175–184.

172. Himmelblau D. M. Applied nonlinear programming. — McGraw-Hill Companies, 1972.

173. Rastrigin L. A. Extremal control systems // Theoretical foundations of engineering cybernetics series. — 1974. — T. 3.

174. Rudolph G. Globale Optimierung mit parallelen Evolutionsstrategien : Ph. D. thesis / G. Rudolph ; Diplomarbeit, Universit at Dortmund, Fachbereich Informatik. — 1990.

175. Hoffmeister F., Bäck T. Genetic algorithms and evolution strategies: Similarities and differences // International Conference on Parallel Problem Solving from Nature / Springer. — 1990. — C. 455–469.

176. Mühlenbein H., Schomisch M., Born J. The parallel genetic algorithm as function optimizer // Parallel computing. — 1991. — T. 17, № 6-7. — C. 619–632.

177. Song X., Zhao M., Yan Q. и др. A high-efficiency adaptive artificial bee colony algorithm using two strategies for continuous optimization // Swarm and Evolutionary Computation. — 2019. — T. 50. — C. 100549.

Приложение. Программа для ЭВМ «Synthetic porosity by spherical particles»

РОССИЙСКАЯ ФЕДЕРАЦИЯ

СВИДЕТЕЛЬСТВО

о государственной регистрации программы для ЭВМ

№ 2021616253

«Программа для ЭВМ «Synthetic porosity by spherical particles»

Правообладатель: *Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования "Северо-Восточный федеральный университет имени М.К. Аммосова" (RU)*

Авторы: *Григорьев Василий Васильевич (RU), Саввин Антон Васильевич (RU), Вабищевич Петр Николаевич (RU)*

Заявка № **2021614356**
Дата поступления **02 апреля 2021 г.**
Дата государственной регистрации
в Реестре программ для ЭВМ ***19 апреля 2021 г.***

Руководитель Федеральной службы
по интеллектуальной собственности

Г.П. Ивлиев