УДК 51-76, 57.087.1

С. А. Королев, кандидат физико-математических наук, доцент; Д. В. Майков, аспирант Ижевский государственный технический университет имени М. Т. Калашникова

МЕТОД ИДЕНТИФИКАЦИИ ПАРАМЕТРОВ МОДЕЛИ МЕТАНОГЕНЕЗА В ВИДЕ СИСТЕМЫ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ НА ОСНОВЕ ГЕНЕТИЧЕСКОГО АЛГОРИТМА

Приведены математическая модель, описывающая метаногенез, и метод ее идентификации. Показана эффективность применения генетического алгоритма с вещественным кодированием и обучением лидера методом Хука – Дживса для решения задачи идентификации. Исследована сходимость и точность алгоритма.

Ключевые слова: метаногенез, математическая модель, система обыкновенных дифференциальных уравнений, идентификация параметров, генетический алгоритм

В мире наблюдается рост интереса к альтернативным источникам энергии, в частности к биогазу, что вызвано истощением запасов ископаемых видов топлива, с одной стороны, и эколого-экономическими аспектами – с другой. Так, производство биогаза позволяет переработать отходы животноводства и растениеводства. Поэтому изучение процесса получения биогаза (метаногенеза) является актуальной задачей.

Метаногенез протекает в три этапа (рис. 1) [1]. На первом этапе гидролизные бактерии расщепляют белки, жиры и углеводы до аминокислот, жирных кислот, моносахаридов и воды. На втором этапе кислотообразующие бактерии (ацидогены) вырабатывают органические кислоты, спирты и кетоны, газы (двуокись углерода, сероводород, водород и аммиак). На последнем этапе метанообразующие бактерии (метаногены) выделяют метан, двуокись углерода и воду. На этом этапе вырабатывается 90 % всего метана, 70 % которого получается из уксусной кислоты.

Для описания процесса образования биогаза разработано множество различных математических моделей. В данной статье используется двухстадийная модель, полученная путем модификации модели, представленной в [2] и описывающей популяционную динамику участвующих в процессе бактерий. При этом первый этап процесса не рассматривается. Полученная модель имеет вид:

$$\begin{cases} \frac{dX_{1}}{dt} = \left(\frac{\mu_{1}L_{1}}{\lambda_{1} + L_{1}} - h\right)X_{1}, \\ \frac{dL_{1}}{dt} = -k_{1}\frac{\mu_{1}L_{1}}{\lambda_{1} + L_{1}}X_{1} + h\left(L_{1}^{0} - L_{1}\right), \\ \frac{dX_{2}}{dt} = \left(\frac{\mu_{2}L_{2}}{\lambda_{2} + L_{2}} - h\right)X_{2}, \\ \frac{dL_{2}}{dt} = k_{3}\frac{\mu_{1}L_{1}}{\lambda_{1} + L_{1}}X_{1} - k_{2}\frac{\mu_{2}L_{2}}{\lambda_{2} + L_{2}}X_{2} + h\left(L_{2}^{0} - L_{2}\right), \end{cases}$$
(1)

© Королев С. А., Майков Д. В., 2012

где X_1 и X_2 – концентрации (г/л) ацидогенов и метаногенов соответственно; L_1 и L_2 – концентрации (г/л) растворимого непереработанного органического вещества и ацетат-ионов (анион диссоциированной уксусной кислоты) соответственно; h, k_1 , k_2 , k_3 , λ_1 , λ_2 , μ_1 , μ_2 – параметры модели; t – время, ч.



Рис. 1. Этапы метаногенеза

Начальные значения переменных в момент времени $t_0 = 0$ определяются естественной концентрацией бактерий и веществ в органическом сырье:

$$X_{1}(0) = X_{1}^{0}, X_{2}(0) = X_{2}^{0}, L_{1}(0) = L_{1}^{0}, L_{2}(0) = L_{2}^{0}.$$
 (2)

Для практического использования модели (1) необходимо решить задачу идентификации параметров системы обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) по временному ряду экспериментальных данных.

Пусть имеется система ОДУ:

$$\begin{cases} \frac{dx_1}{dt} = f_1(\mathbf{a}, \mathbf{x}, t), \\ \dots \\ \frac{dx_p}{dt} = f_p(\mathbf{a}, \mathbf{x}, t), \end{cases}$$
(3)

с начальными условиями:

$$\mathbf{x}_0 = \mathbf{x} \left(t_0 \right), \tag{4}$$

где $\mathbf{x} = \{x_i(t)\}$, i = 1, ..., p – неизвестная вектор-функция; $\mathbf{a} = \{a_i\}$, l = 1, ..., m – вектор неизвестных коэффициентов; Ψ^m – область изменения параметров ($\mathbf{a} \in \Psi^m$); время $t \in [t_0, T]$. Требуется найти оценку $\tilde{\mathbf{a}}$ вектора параметров \mathbf{a} по экспериментальным данным $\mathbf{x}_n^e = \mathbf{x}^e(t_n)$, n = 1, ..., N, $t_n \in [t_0, T]$. Экспериментальные данные удобно представить в виде матрицы $X^e = \{x_{i,n}^e\}$, столбцами которой являются векторы \mathbf{x}_n^e .

Для поиска оценок **ã** минимизируется величина относительных отклонений теоретических и экспериментальных значений [3]. Соответствующая целевая функция, определяемая с помощью метода наименьших квадратов, имеет вид:

$$F(\mathbf{a}) = \sum_{n=1}^{N} \sum_{i=1}^{p} \left(\frac{x_i(t_n) - x_{i,n}^e}{x_{i,n}^e} \right)^2.$$
 (5)

В этом случае оценка вектора искомых параметров определяется как точка минимума целевой функции (5):

$$\tilde{\mathbf{a}} = \arg\min_{\mathbf{a}\in\Psi^{m}} F\left(\mathbf{a}\right). \tag{6}$$

Для получения теоретических значений $\mathbf{x} = \mathbf{x}(t)$ численно решается задача Коши для системы (3) с начальными условиями (4). Для этого вводится сетка по времени с шагом $h_k = \frac{T-t_0}{M_k}$, где $M_k + 1$ – число узлов сетки на k -й итерации, k = 1, 2, При этом на k + 1-й итерации число узлов сетки увеличивается вдвое: $M_{k+1} = 2M_k$. Значению функции $\mathbf{x}(t_r)$ в r-й момент времени соответствует значение \mathbf{y}_r^k сеточной функции, $r = 0, 1, ..., M_k$.

Для численного решения системы (3) используется метод Рунге – Кутты 4-го порядка, обладающий хорошими показателями скорости сходимости при сравнительно низких вычислительных затратах. Данный метод состоит в рекуррентном применении следующих соотношений [4]:

$$\mathbf{y}_{r+1}^{k} = \mathbf{y}_{r}^{k} + \frac{1}{6} (\mathbf{z}_{1} + 2\mathbf{z}_{2} + 2\mathbf{z}_{3} + \mathbf{z}_{4}),$$

$$\mathbf{z}_{1} = h_{k} \mathbf{f} \left(\tilde{\mathbf{a}}, \mathbf{y}_{r}^{k}, t_{r} \right),$$

$$\mathbf{z}_{2} = h_{k} \mathbf{f} \left(\tilde{\mathbf{a}}, \mathbf{y}_{r}^{k} + \frac{1}{2}\mathbf{z}_{1}, t_{r} + \frac{1}{2}h_{k} \right),$$

$$\mathbf{z}_{3} = h_{k} \mathbf{f} \left(\tilde{\mathbf{a}}, \mathbf{y}_{r}^{k} + \frac{1}{2}\mathbf{z}_{2}, t_{r} + \frac{1}{2}h_{k} \right),$$

$$\mathbf{z}_{4} = h_{k} \mathbf{f} \left(\tilde{\mathbf{a}}, \mathbf{y}_{r}^{k} + \mathbf{z}_{3}, t_{r} + h_{k} \right),$$

(7)

где $\mathbf{z}_1, \, \mathbf{z}_2, \, \mathbf{z}_3, \, \mathbf{z}_4$ – вспомогательные функции.

Погрешность численного решения системы ОДУ определяется по формуле

$$\phi = \max_{i,r} \left(\frac{y_{i,2r}^{k+1} - y_{i,r}^{k}}{y_{i,r}^{k}} \right), \ i = 1, 2, ..., p, \ r = 0, 1, ..., M_{k}.$$
(8)

График десятичного логарифма погрешности в зависимости от шага приведен на рис. 2. Вычислительный процесс прекращается, когда $\phi < 10^{-4}$. Минимально необходимое значение шага при этом составляет $h = 0, 5 \cdot 10^{-4}$.



Рис. 2. График зависимости логарифма погрешности метода Рунге – Кутты от шага

В качестве алгоритма минимизации целевой функции (5) выбран гибридный генетический алгоритм с вещественным кодированием [5]. Генетический алгоритм эффективно решает многоэкстремальные задачи и задачи высокой размерности. В отличие от алгоритмов локальной оптимизации (Ньютона, сопряженных градиентов и т. д.), для успешной работы которых требуется удачный выбор начального приближения, генетический алгоритм обрабатывает не единственное решение, а множество решений. Как показано в работе [6], для повышения эффективности работы генетического алгоритма используется метод Хука – Дживса для дополнительного поиска в окрестности лучшего решения (обучение лидера методом Хука – Дживса).

Критерием остановки алгоритма является условие, когда изменение целевой функции (5) на k-й итерации (F^k) становится малым для ряда итераций:

$$\chi = \max_{q} \left| \frac{F^{k} - F^{k-q}}{F^{k}} \right| < 10^{-4} , \qquad (9)$$

где $q = 1,..., \min(k, \tau)$; τ – временной лаг, принимаемый равным 100. График зависимости логарифма функции (9) от числа итераций приведен на рис. 3.

Экспериментальные данные, как правило, не могут быть описаны с абсолютной точностью с помощью абстрактной математической модели. Это связано как с наличием неучтенных факторов, так и с погрешностью измерения экспериментальных данных. Отклонение между экспериментальными и модельными значениями принято называть шумом [7].

Для моделирования зашумленных данных предварительно генерируется случайная величина со стандартным нормальным распределением:

$$\xi_{i,n} = \sqrt{2} \left| \ln \alpha_{i,n} \right| \cos 2\pi \beta_{i,n}, \quad i = 1, 2, ..., p, \quad n = 1, 2, ..., N ,$$
 (10)

где $\alpha_{i,n}$, $\beta_{i,n}$ – независимые равномерно распределенные на отрезке [0,1] случайные величины.



Рис. 3. График зависимости логарифма погрешности от числа итераций

Ввиду различного порядка экспериментальных данных (строк матрицы X^e) среднеквадратическое отклонение удобно задать следующим образом:

$$\sigma_i = \delta_i \max_n \left| x_{i,n}^e \right|,$$

где $\delta_i = \delta = \text{const} - \text{параметр, характеризующий степень отклонения в долях.}$

В этом случае зашумленные данные вычисляются как

$$\widehat{\mathbf{x}}_{i,n}^e = \mathbf{x}_{i,n}^e + \mathbf{\sigma}_i \mathbf{\xi}_{i,n} \,. \tag{12}$$

Для оценки параметров моделировался временной ряд (12) на отрезке от 1 до 20 сут. с единичным шагом при наличии шума ($\delta = 0,02$).

Погрешность оценки *l* -го параметра модели составляет [3]:

$$\eta_{l} = \begin{cases} \left| \frac{\tilde{a}_{l} - a_{l}}{a_{l}} \right|, a_{l} \neq 0, \\ \left| \tilde{a}_{l} \right|, a_{l} = 0, \ l = 1, 2, ..., m. \end{cases}$$
(13)

При этом общая погрешность оценивания равна

$$\eta = \max \eta_l, \ l = 1, 2, ..., m.$$
(14)

Для рассматриваемой модели метаногенеза (1) в момент времени $t_0 = 0$ были заданы следующие начальные условия: $X_1(0) = 2,9$ г/л, $X_2(0) = 2,1$ г/л, $L_1(0) = L_1^0 = 7,0$ г/л, $L_2(0) = L_2^0 = 0,0$ г/л (предполагается, что ацетат-ионы отсутствуют).

В таблице приведены точные значения параметров и их оценки, полученные в результате идентификации модели.

Результаты идентификации параметров модели

№ п/п	Параметр	Точное значение, a_l	Оценка параметра, \tilde{a}_l	Погрешность, η_l , %
1	h	0,049	0,051	3,07
2	<i>k</i> ₁	0,745	0,713	4,28
3	<i>k</i> ₂	0,443	0,452	2,05

(11)

				Окончание табл.
№ п/п	Параметр	Точное значение, a_l	Оценка параметра, \tilde{a}_l	Погрешность, η_i , %
4	<i>k</i> ₃	0,786	0,801	1,88
5	λ_1	7,543	7,241	4,01
6	λ_2	4,360	4,517	3,59
7	μ_1	0,197	0,203	3,07
8	μ_2	0,615	0,595	3,24

В соответствии с соотношением (14) общая погрешность оценивания составляет 4,28 %.

Графики теоретических значений переменных, полученных по идентифицированной модели, и экспериментальных данных представлены на рис. 4–5.



*L*₁,*L*₂, г/л Значения: идентифицированные экспериментальные: L_1 Lı 8 L_2 7 6 5 4 3 2 1 4-4 . *t*, сут. 0 10 15 20 0 5 Puc. 5. График зависимостей $L_{1}(t)$ и $L_{2}(t)$

Гибридный генетический алгоритм с вещественным кодированием и обучением лидера методом Хука – Дживса для решения задачи идентификации систем дифференциальных уравнений показал высокую эффективность при идентификации модели метаногенеза. Данный алгоритм обрабатывает множество решений в отличие от алгоритмов локальной оптимизации, не требует вычисления производных в отличие от градиентных методов, эффективно решает многоэкстремальные задачи и задачи высокой размерности.

Библиографические ссылки

1. Эдер Б., Шульц Х. Биогазовые установки : практ. пособие // Сайт компании «Зорг» (Украина). 2006. – URL: http://zorgbiogas.ru/biblioteka/biogas_book/chapter_2 (дата обращения: 25.01.2012).

2. Simeonov I., Noykoval N., Gyllenberg M. Identification and Extremum Seeking Control of the Anaerobic Digestion of Organic Wastes // Сайт журнала «Cybernetics and information technologies». – 2007. – Vol. 7, Nr 2. – Pp. 73-84. – URL: http://www.cit.iit.bas.bg/CIT_07/v7-2/73-84.pdf (дата обращения: 25.01.2012).

3. Безручко Б. П., Смирнов Д. А. Реконструкция обыкновенных дифференциальных уравнений по временным рядам : учеб.-метод. пособие. – Саратов : Колледж, 2000. – 46 с. – URL: http://window.edu.ru/resource/973/29973/files/sgu027.pdf (дата обращения: 24.04.2012).

4. Вержбицкий В. М. Численные методы (математический анализ и обыкновенные дифференциальные уравнения) : учеб. пособие для вузов. – М. : Высш. шк., 2001. – 382 с. – URL: http://www.ph4s.ru/bookpc/chisl metod/chisl met verjb.rar (дата обращения: 24.04.2012).

5. Гладков Л. А., Курейчик В. В., Курейчик В. М. Генетические алгоритмы : учеб. для вузов. – 2-е изд., испр. и доп. – М.: Физматлит, 2010. – 368 с.

6. Дмитриев С. В. Разработка гибридных генетических алгоритмов и схемы их применения для решения задач оптимального управления динамическими системами : дис. ... канд. техн. наук : 05.13.18, 05.13.01 / Ижев. гос. техн. ун-т. – Ижевск, 2007. – 125 с.

7. Хастингс Н., Пикок Дж. Справочник по статистическим распределениям / пер. с англ. А. К. Звонкина. – М. : Статистика, 1980. – 95 с. – (Б-чка иностр. книг для экономистов и статистиков).

*** S. A. Korolev, PhD in Physics and Mathematics, Associate Professor, Kalashnikov Izhevsk State Technical University

D. V. Maykov, Post-graduate, Kalashnikov Izhevsk State Technical University

Method of parameters identification for methanogenesis model as a system of differential equations based on genetic algorithm

A mathematical model of methanogenesis and method of its identification are presented. The efficiency of applying the genetic algorithm with real coding and leader training by Hooke-Jeeve method in order to solve the identification problem is shown. The convergence and accuracy of the algorithm is investigated.

Keywords: methanogenesis, mathematical model, system of ordinary differential equations, parameters identification, genetic algorithm

Получено: 26.01.12