

# 扩散模型参数识别问题

## 摘要

Fick 定律中扩散系数  $D$  是重要的物理性质参数之一，在材料计算科学的传质、吸收、催化等反应的计算和模拟过程中有着重要作用。本文针对扩散系数的参数识别问题，基于连续性问题离散化、反问题求解等思想，结合回归分析、正则化、有限差分、遗传算法等多种方法构建了扩散系数  $D$  识别问题的数学模型，以改进其不适定、非线性和计算量大的问题。

**针对问题一：**已知组元的扩散通量  $J$  和浓度  $C$  的时间和空间分布，对  $J$ 、 $C$  的对应关系进行分析，发现参数识别问题关键在于对应关系是偏微分形式而已知数据为离散形式，因此本文分两步进行求解。第一步求解浓度梯度  $\nabla C$ ，一方面借助欧拉法对离散数据直接进行求解，另一方面通过函数拟合的方法先将离散数据连续化再求梯度，然后进行了对比分析，结果显示用高斯拟合的拟合度  $R^2$  达到 0.9985，且通过拟合可以直接得到浓度  $C$  变化的扩散系数  $D$  的映射关系。第二步通过线性回归分析扩散系数  $D$ ，考虑到用最小二乘估计法进行回归计算可能存在过拟合、不适定性等缺陷，本文又利用吉洪诺夫正则化的方法对其回归过程进行了改良，最后绘制出了随浓度  $C$  变化的扩散系数  $D$  的曲线图，整体大致呈现缓慢上升趋势，其中稳态扩散时  $D$  取 0.054 模型拟合效果最优。

**针对问题二：**仅知道扩散通量  $J$  或浓度  $C$  两者之一的分布求解扩散系数  $D$  是典型的反问题，根据已知的 Fick 定律类比一维传热方程，建立扩散系数的识别模型。针对已知浓度  $C$  的情况，本文首先建立正问题的求解方程，推导出反问题的目标函数，由于方程涉及二阶偏微分，离散数据无法直接求解，故采用有限差分法将微分方程转化为差分方程求数值解。为了解决不适定，计算效率不高的问题，本文采用具有良好的鲁棒性的遗传算法进行迭代搜寻最优解。最后绘制出了两种情况下随浓度  $C$  变化的扩散系数  $D$  的曲线图，其中曲线趋势基本相同，扩散参数均分布在 0.4-0.7 之间。相较于问题一的结果，由于采用遗传算法搜索解，曲线更加离散。

**针对问题三：**研究两个以上变量是否对观测变量产生显著影响属于典型的多因素分析问题。本文对数据的误差水平、数据量和迭代初值的选取三个因素分别进行分析，同时定义精度和精度影响率两个指标，将问题一的求解结果设置成验证集，建立了测试和评价模型。首先利用蒙特卡洛模拟方法对观测数据施加不同强度的观测误差；其次以扩散距离为标准为样本集刻度删除行数据，设置不同  $\Delta\epsilon$  等距删除行数据；然后通过四种迭代初值的选取方式来对扩散系数  $D$  进行求解；通过对不同影响因素条件下计算出的扩散系数  $D$  进行指标的计算，结果显示数据的误差水平对模型精度的影响最大，其次是数据量，迭代初值的选择只影响迭代次数和求解时间，对精度几乎没有影响。

**针对问题四：**本文以 Fick 第二定律为基础，推导出来了扩散问题在高维和多元上的偏微分方程形式以及边界条件，并通过有限差分法得到离散形式，带入上文所建立的模型进行求解。然后将以上步骤设计成流程，将本文模型推广至了高维和多元的情况。最后结合实际情况，设计了液体扩散的数值仿真模拟，结果与相关文献的观测数据基本吻合。

最后，我们对提出的模型进行全面的评价：本文的模型贴合实际，能解决不适定、非线性、计算量大等问题，具有实用性强、算法效率高等特点，该模型在热传导参数识别等反问题上也能使用。

**关键词：**反问题 吉洪诺夫正则化 有限差分法 遗传算法 线性回归 高斯拟合

# 目录

扩散模型参数识别问题.....	I
摘要.....	I
1 问题综述.....	1
1.1 问题背景.....	1
1.2 问题提出.....	1
2 模型假设与符号说明.....	2
2.1 模型基本假设.....	2
2.2 符号说明.....	2
3 问题一的分析与模型建立.....	3
3.1 问题分析.....	3
3.2 模型准备.....	3
3.2.1 数据处理.....	3
3.2.2 评价标准.....	4
3.3 模型建立.....	4
3.3.1 曲线拟合.....	4
3.3.2 欧拉法.....	5
3.3.3 回归分析.....	6
3.4 模型求解.....	7
3.5 问题小结.....	9
4 问题二的分析与模型建立.....	10
4.1 问题分析.....	10
4.2 情况一模型建立.....	10
4.2.1 一维扩散模型.....	10
4.2.2 有限差分法.....	11
4.2.3 遗传算法.....	12
4.3 情况二模型建立.....	13
4.4 模型求解.....	14
4.5 分析总结.....	16
5 问题三的分析与模型建立.....	17
5.1 问题分析.....	17
5.2 模型建立.....	17
5.2.1 定义识别精度.....	17
5.2.2 误差水平建模.....	17
5.2.3 数据量建模.....	17
5.2.4 迭代初值建模.....	17
5.3 模型求解.....	18

5.4 对比分析 .....	20
5.5 本章小结 .....	20
6 问题四的分析与模型建立 .....	21
6.1 问题分析 .....	21
6.2 模型建立 .....	21
6.2.1 高维度建模 .....	21
6.2.2 多组元建模 .....	21
6.3 模型推广 .....	22
6.4 具体情形验证 .....	22
参考文献 .....	25
附 录 .....	26
附录 I: 主要程序/关键代码 .....	26

# 1 问题综述

## 1.1 问题背景

1858年,菲克(Fick)参照了傅里叶(Fourier)于1822年建立的导热方程,建立定量公式,引入扩散通量的概念,得到著名的扩散动力学方程——菲克第一定律。Fick第一定律指出了扩散通量与扩散系数和浓度梯度之间的关系,即扩散通量(在单位时间内通过垂直于扩散方向的单位截面积的扩散物质流量)与该截面处的浓度梯度成正比。而由于考虑到通常的扩散过程大多都是非稳态扩散,物质分布浓度随时间变化,菲克从物质的平衡关系着手,建立了第二个微分方程式,即菲克第二定律。Fick定律中的扩散系数 $D$ 是重要的物理性质参数之一,在材料计算科学的传质、吸收、催化等反应的计算和模拟过程中有着重要作用。

而扩散系数的计算属于反问题中的参数识别问题,即根据扩散通量和浓度由果及因而得到扩散系数,通常具有不适定、非线性和计算量大的特点。在反问题中,用已知观测值对未知的参数等条件进行求解,常见的方法主要有正则化方法、有限元、遗传算法<sup>[1]</sup>。而目前的求解算法一般存在存储量大、稳定性不强和计算效率不高等问题。对反问题的研究目前虽然还很不成熟,但由于应用上的迫切需要,越来越被人们所重视,成为当前研究的热门问题<sup>[2]</sup>。因此,在现有的知识基础上提出高效合理的扩散系数 $D$ 识别问题的数学模型,并针对目前算法存在的问题设计可行的求解算法,从而有效解决上述问题是十分有必要的。

## 1.2 问题提出

基于上述研究背景,本文需要解决以下4个问题:

- (1) 问题 1: 给定初始条件,当不同测量时刻组元的扩散通量 $J$ 和浓度 $C$ 的空间分布均已知时,利用附件 1 和附件 2 提供的数据完成体系中扩散系数 $D$ 识别问题的数学模型求解,并绘制随浓度 $C$ 变化的扩散系数 $D$ 的曲线。
- (2) 问题 2: 基于问题 1,利用附件 1 或附件 2 提供的数据,分别针对组元的扩散通量 $J$ 或浓度 $C$ 只知道其中任意一个时的情况建立扩散系数 $D$ 识别问题的数学模型进行求解,绘制随浓度 $C$ 变化的扩散系数 $D$ 的曲线,并比较分析两种情况计算结果与问题 1 计算结果的异同。
- (3) 问题 3: 综合考虑问题 1 和问题 2,从实验测量数据的误差水平、实验测量数据的数据量和迭代初值的选取方式等因素进行具体分析,总结影响扩散系数识别精度的主要因素。
- (4) 问题 4: 思考如何将上述模型应用并推广于高维和多元组等复杂情形并选择一类具体情形进行说明。

## 2 模型假设与符号说明

### 2.1 模型基本假设

- (1) 假设仅考虑给定温度下扩散对物质运输的影响。
- (2) 假设使用回归模型时误差项呈独立的正态分布。
- (3) 假设扩散效应不受重力的影响。
- (4) 假设扩散组元不会溢出边界。
- (5) 假设一维扩散过程中扩散方向是单一的，扩散过程是连续的。

### 2.2 符号说明

本文定义了如下【数字】个使用次数较多的符号，其余符号在使用时注明。

表 2.1 符号说明

序号	符号	含义
1	$R^2$	拟合度
2	$y_i$	真实值
3	$\hat{y}_i$	预测值
4	$D^0$	迭代初值
5	$\emptyset$	精度影响率
6	$\Delta\varepsilon$	扰动幅度
7	$W$	系数/系数矩阵
8	$S$	半宽度信息
9	$J(x)$	损失函数
10	$R_n(x)$	佩亚诺余项

### 3 问题一的分析与模型建立

#### 3.1 问题分析

问题一要求我们基于给定的扩散通量  $J$  和浓度  $C$ ，建立求解扩散系数  $D$  的模型，针对现有方法的弊端设计可行的计算方法，得出随浓度  $C$  变化的扩散系数  $D$  的曲线。

本文先对数据进行预处理，再对数据进行求解。一方面直接通过欧拉法求解  $\nabla C$ ，另一方面基于高斯拟合、多项式、指数拟合的方法以某一时刻为基础对浓度  $C$  和距离  $x$  进行拟合，得到二者对应关系，随后对比分析筛选出拟合度最高的方法。然后对所得方程进行偏导从而解得  $\nabla C$ 。基于上述操作选取出来的  $\nabla C$  数值，对目标函数用最小二乘估计法进行回归计算，求解扩散系数  $D$ 。但由于最小二乘估计法存在出现过拟合、不稳定性等问题的可能性，需利用吉洪诺夫正则化的方法对其回归过程进行改良，最后绘制出随浓度  $C$  变化的扩散系数  $D$  的曲线图。

问题一的思路流程如图 3.1 所示：

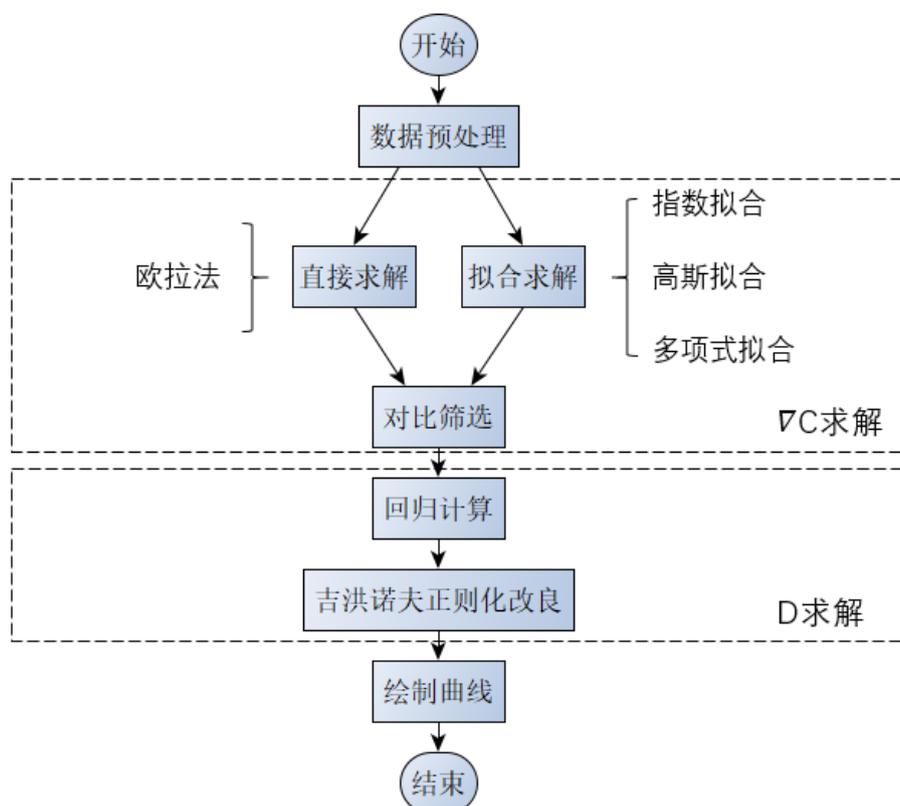


图 3.1 问题 1 思路流程图

#### 3.2 模型准备

##### 3.2.1 数据处理

在实验室进行相关实验和工程实践中我们得到的数据大多数情况都会出现空缺值和异常值，这些不符合实际的偏差值会对我们整个实验结果造成较大的影响，因而在进行正式分析求解之前都会进行预处理的工作。本文对题目所给附件数据进行了如下处理：

第一步是对收集的相关数据进行空缺值筛查，经过相关操作没有发现空缺值；

第二步，采用拉依达准则对数据进行筛选，剔除数据值不在 $\mu \pm 3\sigma$ 范围内的相关数值，经过筛选后发现无异常值，数据预处理完毕。

### 3.2.2 评价标准

#### (1) 均方根误差 (RMSE)

均方根误差，亦称为标准误差，对于  $m$  个样本  $(\vec{x}_1, y_1), (\vec{x}_2, y_2), \dots, (\vec{x}_m, y_m)$ ，某模型的估计值为  $(\vec{x}_1, \hat{y}_1), (\vec{x}_2, \hat{y}_2), \dots, (\vec{x}_m, \hat{y}_m)$ 。表示如式 (3-1) 所示：

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{m} \sum_{i=1}^m (y_i - \hat{y}_i)^2} \quad (3-1)$$

其中， $y_i$ 为真实值， $\hat{y}_i$ 为预测值。RMSE 其实是放大了较大误差之间的差距，根号里面类似于线性回归的损失函数，我们把损失函数放在测试集上求得损失值，开根号是为了更好的描述数据。RMSE 越小，表示误差越小。

#### (2) 拟合度

拟合度是指回归曲线对观测值的拟合程度，度量拟合优度的统计量是可决系数 $R^2$ 。可决系数，亦称测定系数、确定系数、决定系数、可决指数。计算样本的总平方和 TSS， $TSS = \sum_{i=1}^m (y_i - \bar{y})^2$ ，残差平方和 RSS， $RSS = \sum_{i=1}^m (\hat{y}_i - y_i)^2$ 。

定义 $R^2 = 1 - RSS/TSS$ ，如下式 (3-2) 所示：

$$R^2 = 1 - \frac{\sum (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum (y_i - \bar{y})^2} \quad (3-2)$$

其中，分子是我们训练出来的模型预测的所有误差，分母表示期望样本误差。 $R^2$  越大，拟合效果越好。 $R^2$  的最优值为 1，若预测模型为随机值， $R^2$  有可能为负值；若预测值恒为样本期望， $R^2$  为 0。

## 3.3 模型建立

### 3.3.1 曲线拟合

#### (1) 多项式拟合

利用多项式函数拟合数据点，多项式函数形式如下：

$$y(x, W) = w_0 + w_1x + \dots + w_mx^m = \sum_{i=0}^m w_ix^i \quad (3-3)$$

其中  $W$  为多项式系数，将多项式转化为矩阵的形式：

$$W = \begin{bmatrix} w_0 \\ w_1 \\ \vdots \\ w_m \end{bmatrix}, X = \begin{bmatrix} 1 & x_1 & \dots & x_1^m \\ 1 & x_2 & \dots & x_2^m \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_n & \dots & x_n^m \end{bmatrix} \quad (3-4)$$

然后化为线性代数形式：

$$y(x, W) = XW \quad (3-5)$$

最后根据最小二乘法构建增广矩阵进行求解。

## (2) 高斯拟合

设有一组试验数据  $(x_i, y)$  ( $i = 1, 2, 3, \dots$ ) 可用高斯函数描述。

$$y_i = y_{max} \times \exp\left[-\frac{(x_i - x_{max})^2}{S}\right] \quad (3-6)$$

式中待估参数  $y_{max}$ 、 $x_{max}$  和  $S$  分别为高斯曲线的峰值、峰值位置和半宽度信息。上式两边取自然对数，化为：

$$\ln y_i = \ln y_{max} - \frac{(x_i - x_{max})^2}{S} = \left(\ln y_{max} - \frac{x_{max}^2}{S}\right) + \frac{2x_i x_{max}}{S} - \frac{x_i^2}{S} \quad (3-7)$$

令

$$\ln y_i = z_i, \quad \ln y_{max} - \frac{x_{max}^2}{S} = b_0, \quad \frac{2x_{max}}{S} = b_1, \quad -\frac{1}{S} = b_2 \quad (3-8)$$

并考虑全部试验数据，则 (3-8) 式以矩阵形式可表示为：

$$\begin{bmatrix} z_0 \\ z_1 \\ \vdots \\ z_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 \\ 1 & x_2 & x_2^2 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_n & x_n^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_0 \\ b_1 \\ b_2 \end{bmatrix} \quad (3-9)$$

简记为：

$$Z = XB \quad (3-10)$$

根据最小二乘原理，构成的矩阵  $B$  的广义最小二乘解为：

$$B = (X^T X)^{-1} X^T Z \quad (3-11)$$

再根据 (3-8) 式求出待估参数  $y_{max}$ 、 $x_{max}$  和  $S$ ，得到 (3-3) 式高斯函数的特征参数。

## (3) 指数拟合

如果数据点  $(x_i, y_i)$  ( $i = 1, 2 \dots n$ ) 的分布近似指数曲线，则可考虑用指数函数  $y = be^{ax}$  去拟合数据，按照最小二乘的原理， $a$ 、 $b$  的选取应该使得  $F(a, b) = \sum_{i=1}^n (y_i - be^{ax_i})^2$  最小。

这时导出的正则方程组是关于参数  $a$  和  $b$  的非线性方程组，非线性最小二乘问题的求解比较复杂，但若首先处理数据点，可进行线性拟合。

$\ln y = ax + \ln b$ ，故可以先求出数据组  $(x_i, \ln y_i)$  的最小二乘拟合直线  $y = a_0 + a_1 x$  得  $\ln y = a_0 + a_1 x \Rightarrow y = e^{a_0} e^{a_1 x}$

### 3.3.2 欧拉法

欧拉法又叫欧拉折线法，几何意义很明显，就是用折线逼近曲线。微分方程的本质特征是方程中含有导数项，数值解法的第一步就是设法消除其导数值，这个过程称为离散化<sup>[3]</sup>。实现离散化的基本途径是用向前差商来近似代替导数，这就是欧拉算法实现的依据。

对于目标方程，对于任意位置的浓度  $C$  微分形式如下：

$$C(x + \Delta x) = C(x) + \frac{\partial C}{\partial x} \Delta x \quad (3-12)$$

转化成离散形式:

$$\frac{\partial C}{\partial x} = \frac{C(x + \Delta x) - C(x)}{\Delta x} \quad (3-13)$$

同理可整理成:

$$\frac{\partial}{\partial x} C(x) = \frac{C(x - \Delta x) - C(x + \Delta x)}{2\Delta x} \quad (3-14)$$

故可以通过相邻的两点求解某位置的浓度梯度, 然后递归得出在所有位置的浓度梯度  $\nabla C$ 。

### 3.3.3 回归分析

#### (1) 线性回归

在标准线性回归中, 通过最小化真实值 ( $y_i$ ) 和预测值 ( $\hat{y}_i$ ) 的平方误差来训练模型, 这个平方误差值也被称为残差平方和 (RSS, Residual Sum Of Squares) :

$$RSS = \sum_{i=1}^m (y_i - \hat{y}_i)^2 \quad (3-15)$$

最小二乘法即最小化残差平方和, 为:

$$J_{\beta}(\beta) = \arg_{\beta} \min \sum_{i=1}^p (y_i - x_i \beta_i - \beta_0)^2 \quad (3-16)$$

将其化为矩阵形式:

$$J_{\beta}(\beta) = \arg_{\beta} \min (y - X\beta)^T (y - X\beta) \quad (3-17)$$

#### (2) 吉洪诺夫正则化改良

在数学, 统计学和计算机科学中, 特别是反问题, 正则化是为了解决不适定问题或防止过拟合而引入额外信息的过程。吉洪诺夫正则化 (Tikhonov) 又称为 L2 正则化, 是不适定问题正则化最常用的方法。在统计学上, 这种方法被称为岭回归, 在机器学习中, 它被称为权值衰减<sup>[4]</sup>。该方法通过放弃最小二乘法的无偏性, 以损失部分信息、降低精度为代价获得回归系数更为符合实际、更可靠的回归方法。

为了解决上述问题, 我们需要将不适定问题转化为适定问题, 在矩阵  $X^T X$  的对角线元素上加入一个小的常数值  $\lambda$ , 然后取其逆求得系数:

$$\hat{\beta}_{ridge} = (X^T X + \lambda I_n)^{-1} X^T Y \quad (3-18)$$

- $I_n$  是单位矩阵, 对角线全是 1, 类似与山岭
- $\lambda$  是岭系数, 改变其数值可以改变单位矩阵对角线的值

随后, 代价函数  $J_{\beta}(\beta)$  在 RSS 的基础上加入了对系数值的惩罚, 变为矩阵形式为:

$$\begin{aligned}
 J_{\beta}(\beta) &= \sum_{i=1}^p (y_i - x_i\beta)^2 + \lambda \sum_{j=0}^n \beta_j^2 \\
 &= \sum_{i=1}^p (y_i - x_i\beta)^2 + \lambda \|\beta\|^2
 \end{aligned}
 \tag{3-19}$$

- $\beta_j$ 是总计  $p$  个特征中第  $j$  个特征的系数
- $\lambda$ 是超参数，用来控制对 $\beta_j$ 的惩罚强度， $\lambda$ 值越大，生成的模型就越简单。 $\lambda$ 的理想值应该是像其他超参数一样通过调试获得的。在 `sklearn` 中，使用 `alpha` 参数来设置入。
- $\|\beta\|^2$ 为 L2 范数
- $\lambda\|\beta\|^2$ 为收缩惩罚项 (shrinkage penalty)，因为它试图“缩小”模型，减小线性回归模型的方差。它也称为正则化的 L2 范数。

### 3.4 模型求解

#### (1) 拟合结果分析

本文借助 `matlab` 拟合工具箱，对  $t=0.2$  时刻下进行拟合逼近。为了提升拟合效果，以及同时考虑到后面的求解，故采用的二次指数拟合、三次多项式拟合和一次高斯拟合 (一次、二次表示函数中  $x$  的最高次幂) 得到结果如下图所示：

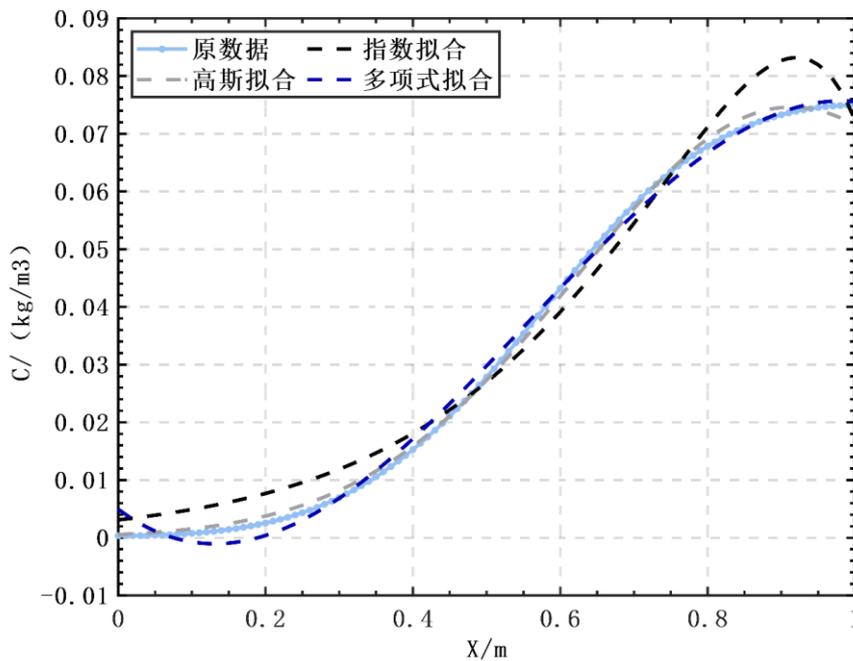


图 3.2 拟合结果曲线图

通过对评价标准均方根误差和拟合度的计算可得出如下表格：

表 3.1 评价标准计算汇总表

Fit name	RMSE	$R^2$
指数拟合	0.0041	0.9799
高斯拟合	0.0011	0.9985
多项式拟合	0.0016	0.9971

从图 3.2 中曲线我们可以看出高斯拟合最接近原数据,  $R^2$  为 0.9985, 拟合效果最优。但计算结果显示曲线边缘出现了一定的误差, 当转化成  $\nabla C$  求解的时候会扩大误差差异。而高斯拟合方法是均方根误差最小的方法, 且为一次幂函数, 可以降低微分带来的误差, 更加符合实际情况。综上所述本文选择高斯拟合方法来进行拟合计算。

(2) 回归分析求解

基于目标函数是线性函数的情况, 首先对求解出来的  $\nabla C$  与扩散通量  $J$  进行线性回归计算。由于反问题参数计算普遍存在着过拟合、不稳定性问题, 因而利用了吉洪诺夫正则化方法对线性回归进行了改良计算, 旨在减小或消除过拟合和不稳定性对计算结果的不良影响, 计算结果如下表所示:

表 3.2 岭回归分析结果

K=0.001	非标准化系数		标准化系数	$t$	$p$	$R^2$	调整 $R^2$	$F$
	B	标准误差	Beta					
常数	0	0	-	-5.142	0.000***	0.993	0.993	67765.031 (0.000***)
$\nabla C$	-0.054	0	-0.995	-260.317	0.000***			

因变量:  $j$

注: \*\*\*, \*\*, \* 分别代表 1%、5%、10% 的显著性水平

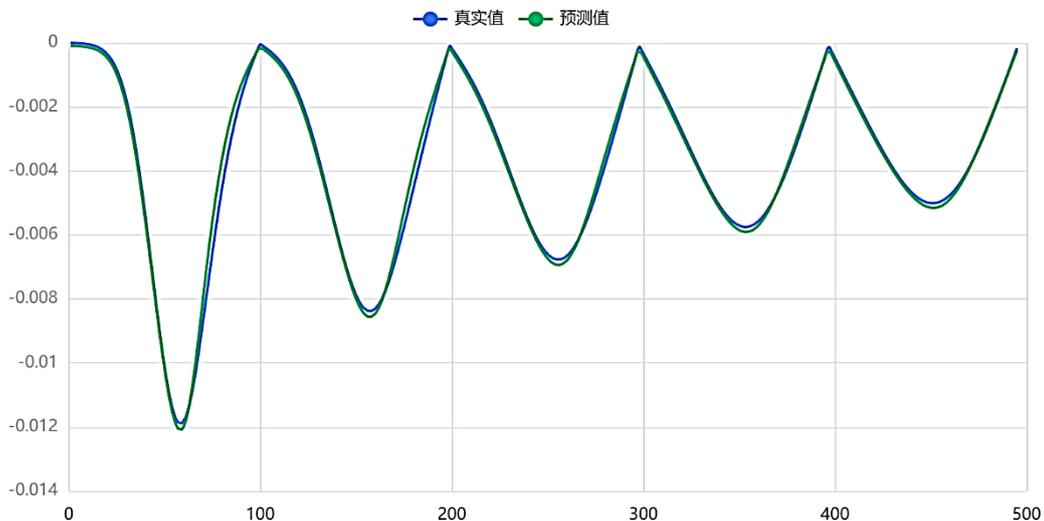


图 3.3 模型结果图

从吉洪诺夫正则化改良后结果可知：基于字段 $\nabla C$ 回归模型显著性 $p$ 值为0.000\*\*\*，水平上呈现显著性，拒绝原假设，表明自变量与因变量之间存在着回归关系。同时，模型的拟合优度 $R^2$ 为0.993，模型表现为较为优秀，因此模型基本满足要求。求解得出稳态扩散下模型的公式：

$$J = -0.054 \times \nabla C \quad (3-20)$$

最后绘制出来的随浓度  $C$  变化的扩散系数  $D$  的曲线如下图所示：

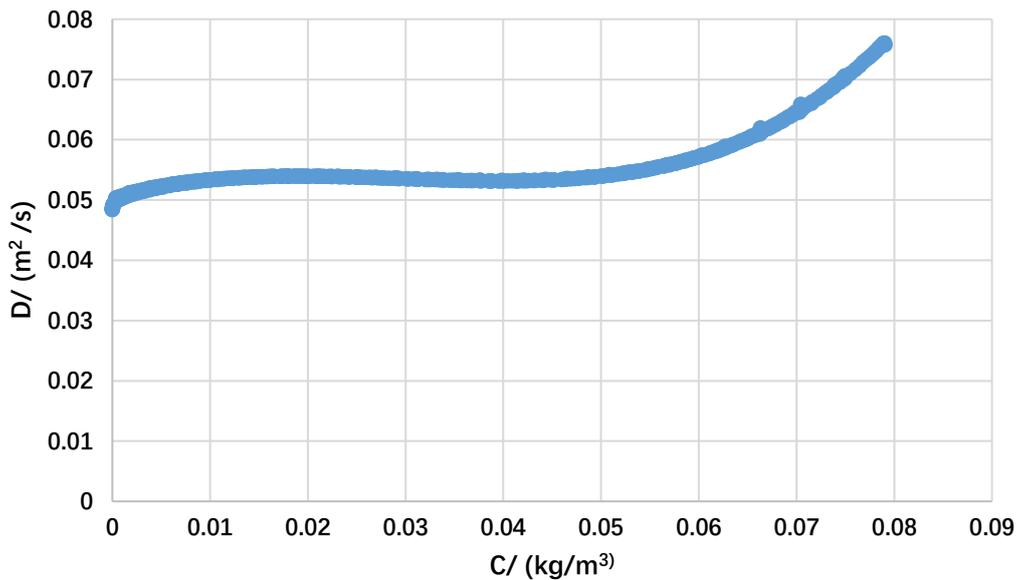


图 3.4 D 随 C 变化的变化趋势图

该图为散点图，由于回归模型的优越性，使离散的数据经过计算呈现出一条平滑的曲线。

### 3.5 问题小结

问题一要求我们建立新的数学模型，求解得到随浓度  $C$  变化的扩散系数  $D$  的曲线。本文首先通过对附件给出的数据进行预处理，包括空缺值判断、拉依达准则筛选剔除异常值等，未发现空缺值和异常值。数据预处理后又通过多项式拟合，高斯拟合，指数拟合对浓度  $C$  相关数据进行了拟合计算，对比选出高斯拟合方法作为本文计算方法得出 $\nabla C$ 。其次对目标函数进行了线性回归计算，并利用吉洪诺夫正则化方法对线性回归改良，进行岭回归计算，得出模型方程式： $J = -0.054 \times \nabla C$ 。最后依据计算结果绘制出先缓慢下降其次缓慢上升最后急剧上升的浓度  $C$  变化的扩散系数  $D$  的曲线图。

## 4 问题二的分析与模型建立

### 4.1 问题分析

以情况一为例进行分析：

问题二要求我们利用扩散通量  $J$  或浓度  $C$  两者之一的数据，在另一数据未知的条件下，分别建立扩散系数  $D$  识别的数学模型，并比较分析两种情形计算结果与问题 1 结果的异同。由分析附件 C 可知，该问题为典型的一维扩散过程的反问题，类似于在一维热传导过程，要求根据  $C$  的分布反演得出  $D$ 。首先将样本数据可视化，得：

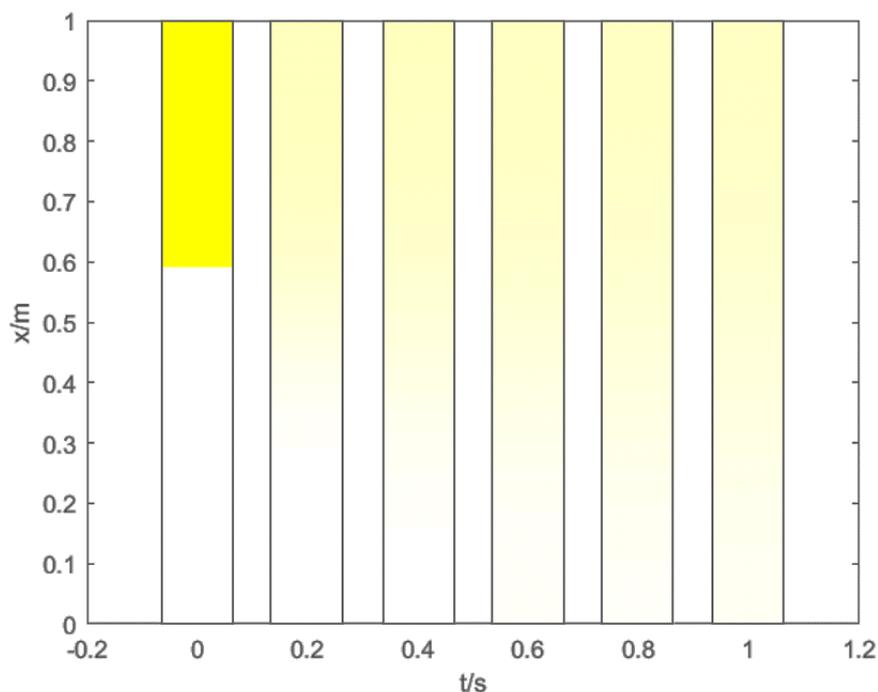


图 4.1 一维扩散过程可视化图

实际过程类似于将一杯充满两种液体的试管抽去中间隔板，上面的液体向下扩散，扩散过程遵守 Fick 定律，即求解一维偏微分方程的数值解。本文结合遗传算法、有限差分法和正则化技术给出了一类求解反问题的数学模型。

### 4.2 情况一模型建立

#### 4.2.1 一维扩散模型

以组元的扩散通量  $J$  未知，浓度  $C$  的空间分布已知为例，正问题的基本方程：

平面直角坐标系下一维稳态扩散场分布的偏微分方程为：

$$\frac{\partial C}{\partial T} = \frac{\partial}{\partial x} \left[ D(x) \frac{\partial C}{\partial x} \right] \quad (4-1)$$

我们考虑到以为扩散方程的边界值问题：

$$C(x, 0) = \begin{cases} 0, & 0 \leq x \leq 0.58 \\ 0.08, & 0.59 \leq x \leq 1 \end{cases} \quad (4-2)$$

$$C(0, t) = f(t), \quad t > 0 \quad (4-3)$$

$$\frac{\partial C}{\partial x}(1, t) = 0, \quad t > 0 \quad (4-4)$$

以及测量条件:

$$C(x, t) = g(t) \quad (4-5)$$

如果 $D(x)$ 已知, 利用(4-1)-(4-4)求解 $C(x, t)$ 称为正问题, 现在,  $D(x)$ 未知, 我们的目的是利用测量条件(4-5), 由方程(4-1)-(4-4)去反求扩散系数 $D(x)$ , 这样就构成了扩散系数的识别问题<sup>[5]</sup>。

假设用 $C_{ob} = C_{ob}(x, t)$ 表示初边值问题(4-1)-(4-4)的观测值, 进一步假设 $D(x)$ 在某些点 $x_1, x_2, \dots, x_l$ 处的值 $D_1, D_2, \dots, D_l$ 已知, 参数识别问题就是根据 $C(x, t)$ 的观测值 $C_{ob}$ 和 $D(x)$ 的预测值 $D_i$  ( $i=1, 2, \dots, l$ )及已知的初边值条件来确定扩散系数 $D(x)$ , 使得由 $D(x)$ 决定的正问题的解逼近 $C(x, t)$ 的观测值。因此目标函数可定义为:

$$\min J(x) = \frac{1}{l} \sum_{i=1}^l (C(x, t) - C_{ob})^2 \quad (4-6)$$

显然该目标函数依赖于观测数据和模型中的参数, 因而目标函数可能是很复杂的, 比如, 目标函数是非凸的, 在模型方程中包含的误差或者观测数据的误差过大的情况下甚至是多极值的。本章节采用问题1的正则化处理方法对该目标函数进行修正。

#### 4.2.2 有限差分法

有限差分法 (Finite Difference Method, FDM) 是一种求解微分方程数值解的近似方法, 其主要原理是对微分方程中的微分项进行直接差分近似, 从而将微分方程转化为代数方程组求解<sup>[6]</sup>。该问题中所给附件为不同位置和时间的浓度和扩散通量, 属于离散型, 而扩散方程是一维微分方程, 无法直接求解。因此本文主要有有限差分法将方程中的一阶还有二阶偏导数进行离散化, 推导出一种可以用程序求解的形式。求解步骤如下:

1. 将 $x$ 与 $t$ 分别在横坐标与纵坐标上进行划分

$x$ 步长:  $\Delta x = \frac{b-a}{N}$ , 得到关于 $x_j$ 与 $t_n$ 的表达式:

$$x_j = a + (j-1)\Delta x \quad (4-7)$$

$$t_n = 0 + (n-1)\Delta t \quad (4-8)$$

将函数进行近似替换 $C_j^n \approx C(x_j, t_n)$

2. 根据泰勒展开将公式进行代换

对于任意一个 $x_j$ 对 $t$ 进行展开:

$$C(x_j, t_n + \Delta t) = C(x_j, t_n) + \frac{\partial C}{\partial t}(x_j, t_n)\Delta t + \dots R_n(x) \quad (4-9)$$

其中 $R_n(x)$ 为佩亚诺(Peano)余项。

由于很难求出函数的偏导，所以需要将其所有偏导形式转换成容易求解出来的离散形式，首先用一维扩散方程进行替换：

$$\frac{\partial C}{\partial t}(x_j, t_n) = a^2 \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}(x_j, t_n) + f(x_j, t_n) \quad (4-10)$$

利用上式联立下面两个式子：

$$C(x_j + \Delta x, t_n) = C(x_j, t_n) + \frac{\partial C}{\partial t}(x_j, t_n)\Delta x + 1/2 \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}(x_j, t_n)\Delta x^2 + \dots + R_n(x) \quad (4-11)$$

$$C(x_j - \Delta x, t_n) = C(x_j, t_n) - \frac{\partial C}{\partial t}(x_j, t_n)\Delta x + 1/2 \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}(x_j, t_n)\Delta x^2 - \dots + R_n(x) \quad (4-12)$$

$$\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}(x_j, t_n) \approx \frac{C_{j+1}^n + C_{j-1}^n - 2C_j^n}{\Delta x^2} \quad (4-13)$$

最后得到递推关系式：

$$C_j^{n+1} = C_j^n + \left[ a^2 \frac{C_{j+1}^n + C_{j-1}^n - 2C_j^n}{\Delta x^2} \right] \Delta t \quad (4-14)$$

化成易于用程序求解的形式

1. 在时间维度上进行递推

首先设置两个时间向量，将所有的位置包括其中

$$C^n = \begin{pmatrix} C_1^n \\ \vdots \\ C_{N+1}^n \end{pmatrix} \quad C^{n+1} = \begin{pmatrix} C_1^{n+1} \\ \vdots \\ C_{N+1}^{n+1} \end{pmatrix} \quad (4-15)$$

2. 建立系数矩阵

$$\begin{pmatrix} \emptyset \\ \text{第一取值} \\ \vdots \\ \text{第N取值} \\ \emptyset \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 & 0 & \dots \\ 1 & -2 & 0 & 0 & \dots \\ & & \vdots & & \\ \dots & 0 & 1 & -2 & 1 \\ \dots & 0 & 0 & 1 & -2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_1^n \\ C_2^n \\ \vdots \\ C_{N+1}^n \end{pmatrix} \quad (4-16)$$

以系数矩阵 A 的第二行为例，与右边的列向量相乘得到结果相乘得到结果  $C_1^n - 2C_2^n + C_3^n$ ，将结果表示成以下列向量。

3. 得到最终表达式

$$C^{n+1} = C^n + (a^2 \frac{1}{\Delta x^2} AC^n) \Delta t \quad (4-17)$$

### 4.2.3 遗传算法

目前大多数文献都采用梯度优化方法求解反问题，由于模型误差和观测误差使目标函数复杂化，其解常常是振荡的和收敛的，且依赖于初始搜索点<sup>[7]</sup>。有许多非线性方

法可用于解决这一问题，遗憾的是大多数方法至少具有以下两条缺点之一：要么是计算量过大，要么是容易陷于局部极小。有效解决这一问题的方法之一是采用具有良好的鲁棒性的算法，遗传算法是一种有效的非线性优化方法，它基于生物界中普遍存在的遗传、变异、进化等过程，在许多方面，都有别于经典的优化方法，已经应用到线性规划、图像识别和参数反演等领域<sup>[8]</sup>。

遗传算法流程示意图如下图 4.2 所示：

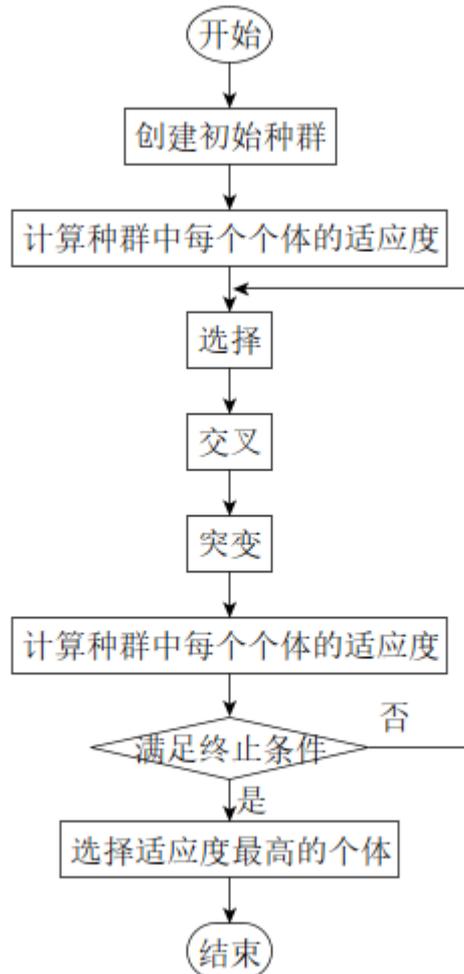


图 4.2 遗传算法流程示意图

问题二基于遗传算法的优化模型构建流程为：

- 1、首先采用二进制编码的方式对输入扩散系数  $D$  进行编码，随机产生基于二进制编码的初始化种群，定义适应度函数和终止条件；
- 2、计算初始化种群中的每个个体的适应度函数值；
- 3、判断当前种群迭代次数下是否满足终止条件，若满足，则解码输出当前最优解，否则采用交叉、变异的方式对种群进行下一轮的迭代优化，采用轮盘赌法在当前种群的基础上选择进化后的种群，直到种群满足优化的终止条件，停止对分子描述符数据的优化过程，并解码输出近似最优解。

### 4.3 情况二模型建立

以组元的扩散通量  $J$  已知，浓度  $C$  的空间分布未知为条件，建立一维扩散模型：

### (1) 正问题的基本方程

首先假设  $D$  是常数，已知方程：

$$J = -D \frac{\partial C}{\partial x} \quad (4-18)$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\frac{\partial J}{\partial x} \quad (4-19)$$

方程 1 两边对偏导：

$$\frac{\partial J}{\partial t} = -D \frac{\partial^2 C}{\partial x \partial t} \quad (4-20)$$

交换微分循序：

$$\frac{\partial J}{\partial t} = -D \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\partial C}{\partial t} \right) \quad (4-21)$$

将 2 式带入上式：

$$\frac{\partial J}{\partial t} = -D \frac{\partial}{\partial x} \left( -\frac{\partial J}{\partial x} \right) \quad (4-22)$$

整理得：

$$\frac{\partial J}{\partial t} = D \frac{\partial^2 J}{\partial x^2} \quad (4-23)$$

由此不难看出，上式与 Fick 第二定律中  $\frac{\partial C}{\partial t}$  的方程的对应关系一样，仅未知数不同，故接下来的建模步骤同情况一。

## 4.4 模型求解

### (1) 模型仿真与验证

在假设  $C$  数据未知，仅知道  $C(0, t), C(x, 0), C(x, t)$  的边界条件下，通过基于有限差分法建立的模型进行仿真，假设  $D=0.06$  得出结果如下，并与原始数据进行对比：

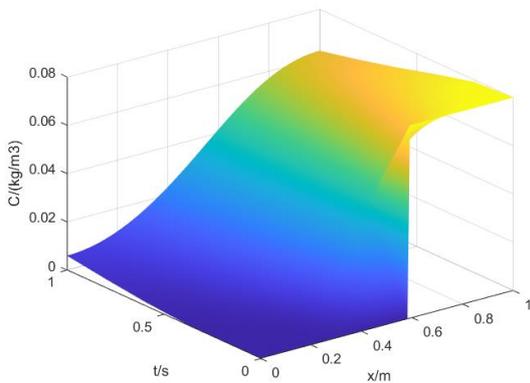


图 4.3-a 源数据模拟图

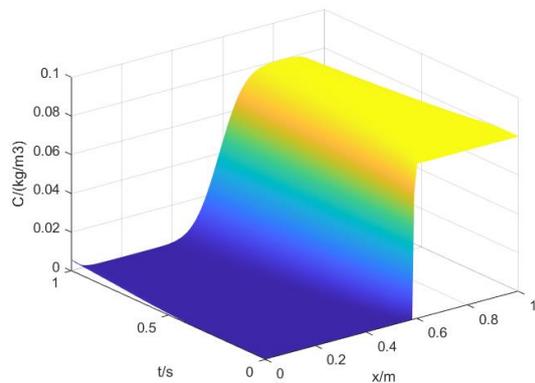


图 4.3-b 有限差分法仿真结果图

该模型为多维拟合，计算得出  $R^2$  为 0.81，模型拟合效果良好。在该模型的基础上，进行遗传算法求解，搜索各点适应度最高的扩散参数  $D$ 。

在  $t=0.2$ 、 $0.4$ 、 $0.6$ 、 $0.8$ 、 $1$  处随机选择五个样本进行搜索最优解，对遗传算法进行验证，得迭代结果如下图所示：

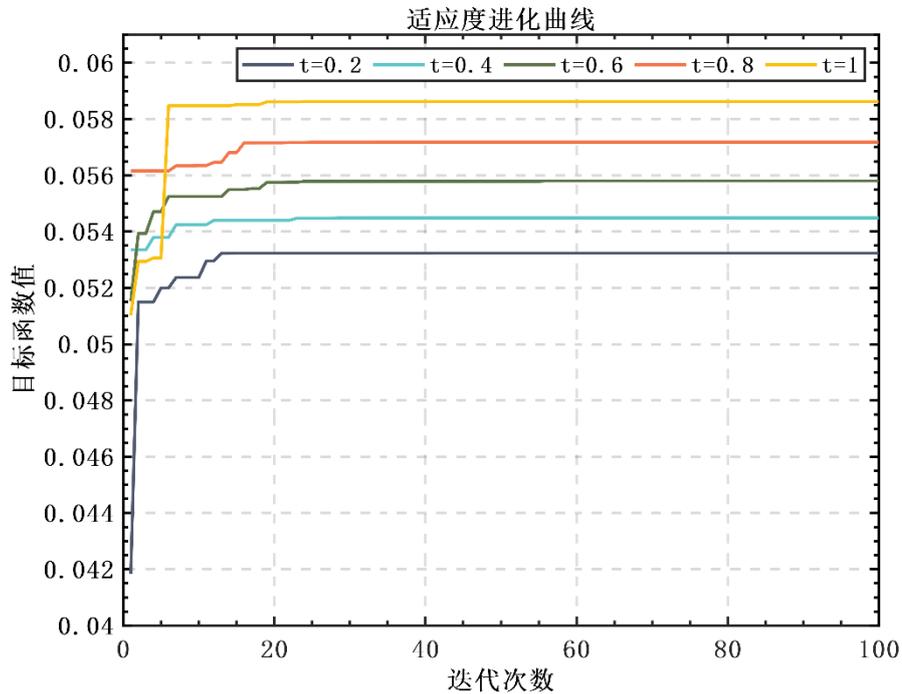


图 4.4 遗传算法迭代图

可知模型收敛速度较快，迭代结果与问题一解得的误差较小。通过遗传算法可以降低模型的计算量。

## (2) 模型结论

针对情况一，将数据样本  $C$  导入该模型，得到扩散系数  $D$  随浓度  $C$  的变化曲线：

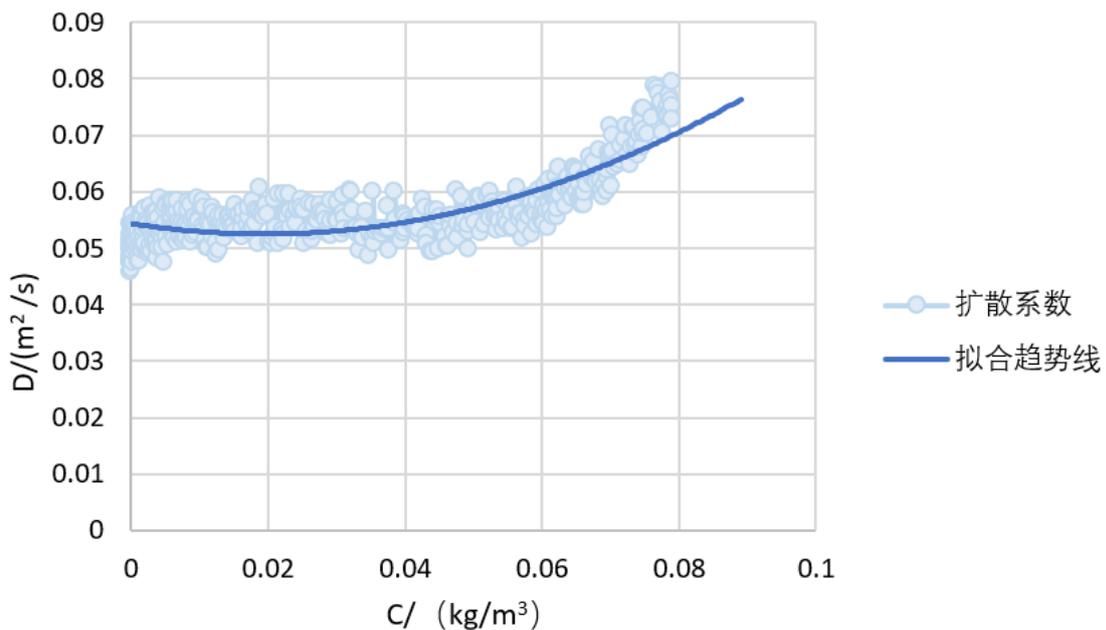


图 4.5 情况 1 条件下  $D$  随  $C$  变化曲线

针对情况二，将数据样本 J 导入该模型，得到扩散系数  $D$  随浓度  $C$  的变化曲线：

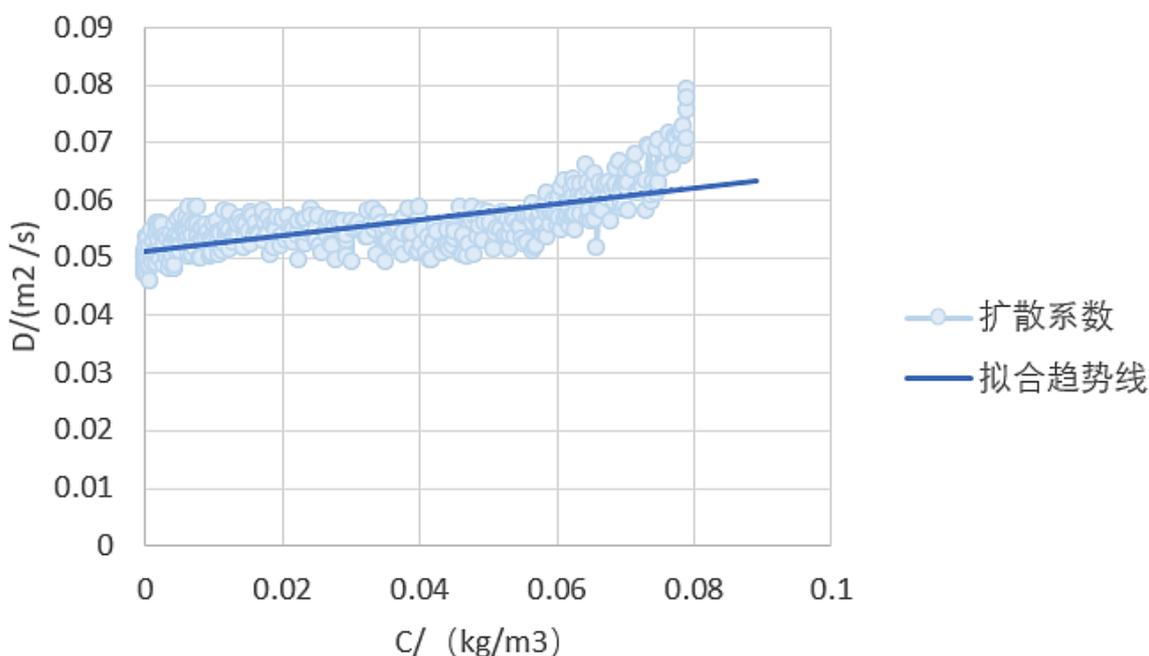


图 4.6 情况 2 条件下  $D$  随  $C$  变化曲线

## 4.5 分析总结

本章节针对已知浓度  $C$  的情况，首先建立正问题的求解方程，推导出反问题的目标函数，由于方程涉及二阶偏微分，离散数据无法直接求解，故采用有限差分法将微分方程转化为差分方程求数值解。为了解决不适定，计算效率不高的问题，本文采用具有良好的鲁棒性的遗传算法进行迭代搜寻最优解。然后将该模型推广至已知扩散通量  $J$  的情况。最后绘制出了两种情况下随浓度  $C$  变化的扩散系数  $D$  的曲线图，其中曲线趋势基本相同，扩散参数均分布在 0.4-0.7 之间。相较于问题一的结果，由于采用遗传算法搜索解，曲线更加离散。

## 5 问题三的分析与模型建立

### 5.1 问题分析

问题三要求我们结合问题 1 和问题 2，从实验测量数据的误差水平、实验测量数据的数据量和迭代初值的选取方式三个方面的因素进行分析，然后总结影响扩散系数  $D$  识别精度的主要因素。

本文基于前两问的模型，针对数据误差水平，设计了蒙特卡洛模拟方法对观测数据施加不同强度的误差，得到在不同误差水平的模型精度；针对数据量，本文采用等距清除数据量的方法，在空间尺度上，设置不同  $\Delta\varepsilon$  等距删除数据，计算得出不同数据量识别精度；针对迭代初值的选取，设计了四种迭代初值的选取方式来对扩散系数  $D$  进行求解，分别得出模型识别精度。

### 5.2 模型建立

#### 5.2.1 定义识别精度

反映测量结果与真值接近程度的量，称为精度，它与误差的大小相对应。为了提高模型的复用性，本章节选用问题一中的拟合度 ( $R^2$ ) 作为精度评价标准。

再定义精度影响率：

$$\phi = \frac{\Delta R^2}{\Delta \varepsilon} \quad (5-1)$$

#### 5.2.2 数据的误差水平建模

蒙特卡洛模拟也称计算机随机模拟，是以随机数集为基础的一种概率统计方法<sup>[9]</sup>。作为一种统计学的分析方法，它的核心是建立虚拟模型。它针对运行前设置模型的初始参数范围和参数选取的特点，按照参数的范围的选取规则，经过无数次的随机获得多个参数模型，基于这多个参数模型用统计学的方法得出其分布特征，这个就是蒙特卡罗模拟的运行思路<sup>[10]</sup>。

本文利用蒙特卡罗模拟法建立随机输入指定数值误差的模型，随机抽取到的样本数值造成不同的误差水平，考虑到误差水平差异太小会影响后续计算和影响度的评价，差异太大不利于迭代计算扩散系数，所以将误差幅度  $\Delta\varepsilon_1$  设置在为常用的 5%、10%、20%、40%，分别计算得出扩散系数  $D$  以及模型识别精度。

#### 5.2.3 数据量建模

本文以空间尺度等间距清除样本数据，以  $\Delta\varepsilon_2 = 0.01、0.02、0.04、0.08$  为间隔值删除相关数据，每距离  $\Delta\varepsilon_2$  就删除下一个距离最近的数据，从而对观测数据的数据量进行扰动，求解在数据缺失的条件下的扩散系数  $D$  和识别精度。

#### 5.2.4 迭代初值的选取建模

为了检验迭代初值选取方式对于扩散系数精度的影响，本文构造了四种不同的选取形式：

方法 1.

$D^n = D^{n-1}_{max}$ ， $D^n$  为前一次迭代出来的局部最优扩散系数，通过把前一次的结果当做下一次迭代初值循环迭代得出最后结果。

方法 2.

随机选取法，令迭代初值在固定区间内随机选取一个数值，固定区间依据题目实际情况和上次迭代结果确定， $D^0 = [-1,1]$ 。

方法 3.

均值法，把上一次求解的扩散系数的平均值当做下一次迭代初值。

$$D^0 = \frac{\sum_{i=1}^n D^i}{n} \quad (5-2)$$

方法 4.

二分法，令迭代初值等于某一区间内的中间值根据结果的精度调节取值区间。

$$D^0 = \frac{b-a}{2}, D^0 \in [a, b] \quad (5-3)$$

上述几种迭代初值中，第一种采用的是传统做法即简单选取前一次的扩散系数作为迭代初值；第二种迭代初值采用随机样本选取求解；第三种方式综合考虑了前面所有计算得出扩散系数给出迭代初值；对于第四种迭代初值，则采用二分法确定。

## 5.3 模型求解

### 5.3.1 数据的误差水平

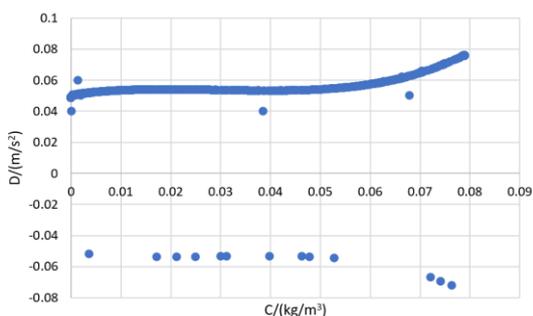


图 5.1-a 在 5% 的扰动下 D 与 C 的关系曲线  
 $R^2=0.79$

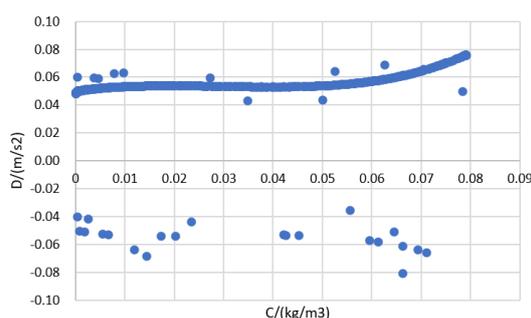


图 5.1-b 在 10% 的扰动下 D 与 C 的关系曲线  
 $R^2=0.68$

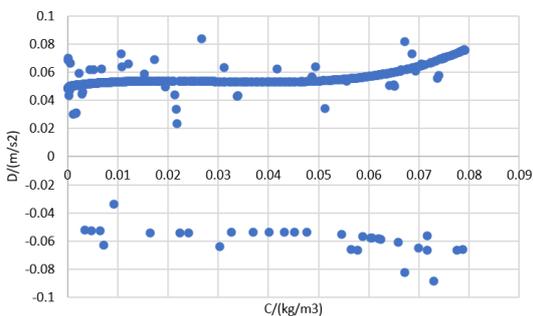


图 5.1-c 在 20% 的扰动下 D 与 C 的关系曲线  
 $R^2=0.56$

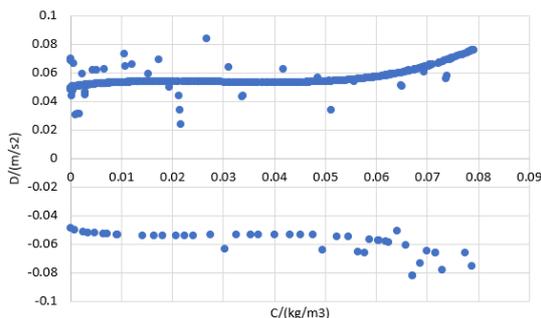


图 5.1-d 在 40% 的扰动下 D 与 C 的关系曲线  
 $R^2=0.42$

### 5.3.2 数据量

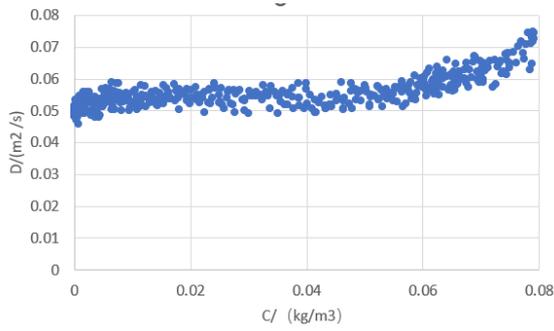


图 5.2-a 等距 0.08 删除数据结果图

$$R^2=0.77$$

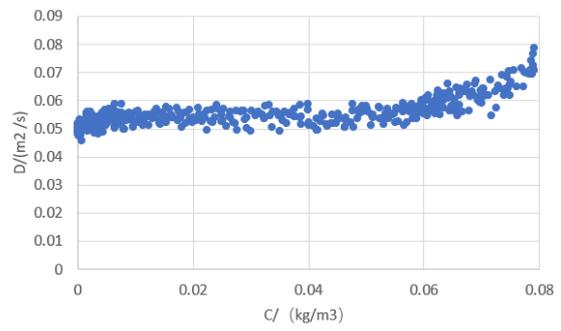


图 5.2-b 等距 0.04 删除数据结果图

$$R^2=0.77$$

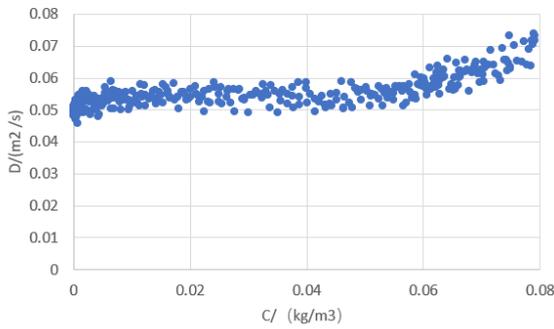


图 5.2-c 等距 0.02 删除数据结果图

$$R^2=0.74$$

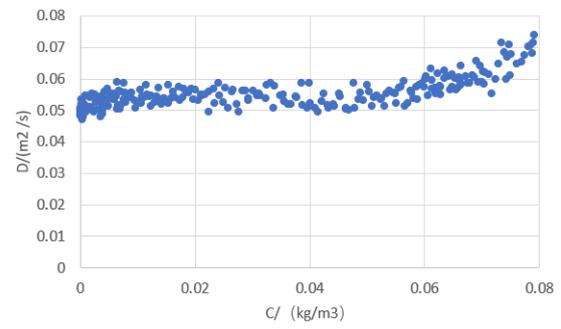


图 5.2-d 等距 0.01 删除数据结果图

$$R^2=0.73$$

### 5.3.3 迭代初值的选取

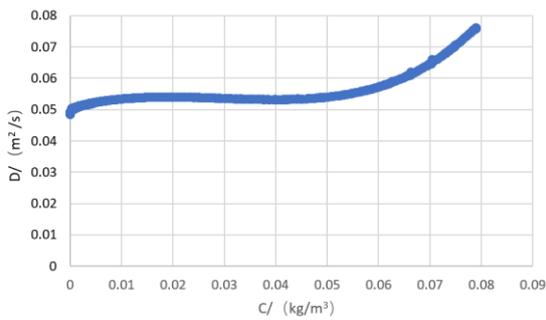


图 5.3-a 以方式 1 选取迭代初值结果图

$$R^2=1$$

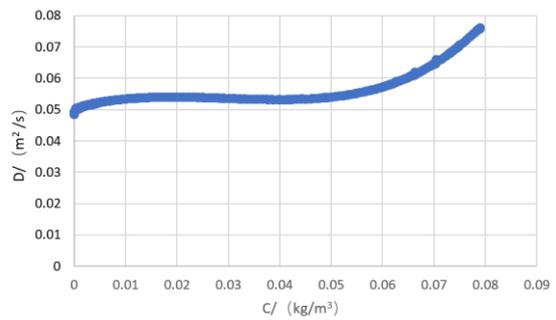


图 5.3-b 以方式 2 选取迭代初值结果图

$$R^2=1$$

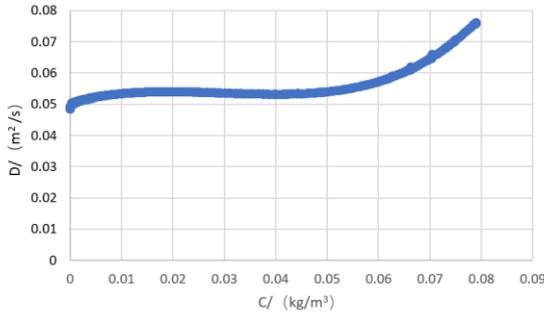


图 5.3-c 以方式 3 选取迭代初值结果图

$$R^2=1$$

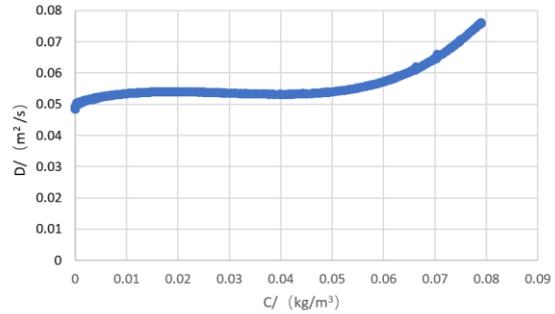


图 5.3-d 以方式 4 选取迭代初值结果图

$$R^2=1$$

## 5.4 对比分析

### (1) 数据误差水平

从图 5.1 可以看出，当增加随机扰动时，会对部分点的  $D$  值产生影响。特别是，本文采用的差分方法处理微分方程，所以在部分点处可能造成不连续等情况，从而导致在差分方程中的上一项减去下一项为负值，在图中体现的即部分  $D$  为负数。

精度影响率  $\phi = 1.25$ ，数据误差水平对模型整体精度影响较大。

### (2) 数据量

从图 5.2 可以看出，当剔除部分数据时，所解得的  $D$  分布也变得稀疏，但是条件没有改变，故整体趋势没有发生变化。由于剔除了部分数据，间隔不连续，所以差分法不再适用，本文用遗传算法求解，得到的解不连续。

精度影响率  $\phi = 0.3$ ，数据量对模型整体精度有一定影响。

### (3) 迭代初值的选取

从图 5.3 可以看出，当改变迭代初值时，函数图像没有改变，因为迭代初值只影响函数求解的速率，当迭代次数足够时，对结果没有很大的影响。

精度影响率  $\phi = 0$ ，迭代初值的选取对模型整体精度基本无影响。

综上所述，对比分析三种因素，不难发现数据误差水平对模型的影响最大，其次是数据量，而迭代初值的选择对模型的精度基本无影响。

## 5.5 本章小结

本章节求解遵照先分后总的思想，将三个影响因素分别建立扰动模型，针对误差水平利用蒙特卡洛施加不同程度的扰动，针对数据量以空间尺度等间距清除样本数据进行扰动，针对迭代初值选取方式通过四种不同方法进行计算产生扰动效果，迭代拟合求出拟合度。最后以定义精度影响率为评判标准对三个因素进行评价得出：实验测量数据的误差水平是影响扩散系数  $D$  识别精度的主要影响因素。

## 6 问题四的分析与模型建立

### 6.1 问题分析

问题四要求我们结合实际问题，将模型应用和推广到多元情况，并选择一类具体情形加以说明。本文以第二问有限差分法为基础，构造多元和多维情况下的参数识别模型。遗传算法是一种启发式算法，通过迭代搜索最优解，因此在高维和多元的情况下同样适用。

### 6.2 模型建立

#### 6.2.1 高维度建模

(1) 正问题的基本方程

多维坐标系下一维稳态扩散场分布的偏微分方程为：

$$\frac{\partial C}{\partial T} = D \left[ \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} + \dots \right] \quad (6-1)$$

我们考虑到以为扩散方程的边界值问题：

$$\begin{cases} C(x, 0) = f_1(x) \\ C(y, 0) = f_2(y) \\ C(z, 0) = f_3(z) \\ \dots \end{cases} \quad (6-2)$$

$$C(0, t) = f_0(t), t > 0 \quad (6-3)$$

以及测量条件：

$$\frac{\partial C}{\partial x}(x, y, z, t) = g(t) \quad (6-4)$$

(2) 有限差分法

同问题一，可以得到以上方程的递推关系式：

$$C^{n+1} = C^n + (D^2 \frac{1}{\Delta x^2} AC^n + f^n) \Delta t \quad (6-5)$$

再进行正则化确定目标函数，然后用遗传算法搜索最优解即可。

#### 6.2.2 多组元建模

(1) 正问题基本方程

由于存在多组元，即扩散空间内有扩散元，假设是一维空间，扩散场分布的偏微分方程如下：

$$\frac{\partial C}{\partial T} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + f(x, t) \quad (6-6)$$

$$f(x, 0) = g_1(t) \quad (6-7)$$

其中  $f(x, t)$  为内扩散元，其他边界条件与问题二相同。

## (2) 有限差分法

通过有限差分得出递推关系式：

$$C^{n+1} = C^n + (a^2 \frac{1}{\Delta x^2} AC^n + f^n) \Delta t \quad (6-8)$$

再进行正则化确定目标函数，然后用遗传算法搜索最优解即可。

## 6.3 模型推广

对于复杂的多维扩散现象的参数识别问题，数值计算方法是一种行之有效的方法。其核心思想是用空间和时间上有限离散节点的浓度值来代替求解域内实际的浓度分布，将扩散微分方程的求解转化为节点浓度代数方程的求解。通常来说，数值计算方法包括以下几个步骤：

- (1) 根据具体情况简化模型，给出微分方程和边界条件；
- (2) 根据有限差分法将连续的微分方程离散化；
- (3) 建立该问题的正问题方程组，通过正则化方法确立目标函数；
- (4) 遗传算法搜索适应度最高的解；
- (5) 与已有样本数据对比，反馈至遗传算法迭代；
- (6) 分析计算结果，根据具体情况选择是否从新计算；

该方法不仅适用于扩散、热传导等现象，实际生活中涉及到微分方程和参数识别的反问题均可使用该方法进行求解。

## 6.4 具体情形验证

以为了方便可视化，以二维单组元的扩散举例，与实际生活中一滴墨水滴入一杯清水中(不考虑重力的影响，扩散仅由分子运动引起)。各维度的边界条件：

$$\begin{cases} C(x, 0) = 0 \\ C(y, 0) = 0 \end{cases} \quad (6-9)$$

将墨水滴视作内扩散元，计算 0.3s 的仿真结果如下图所示：

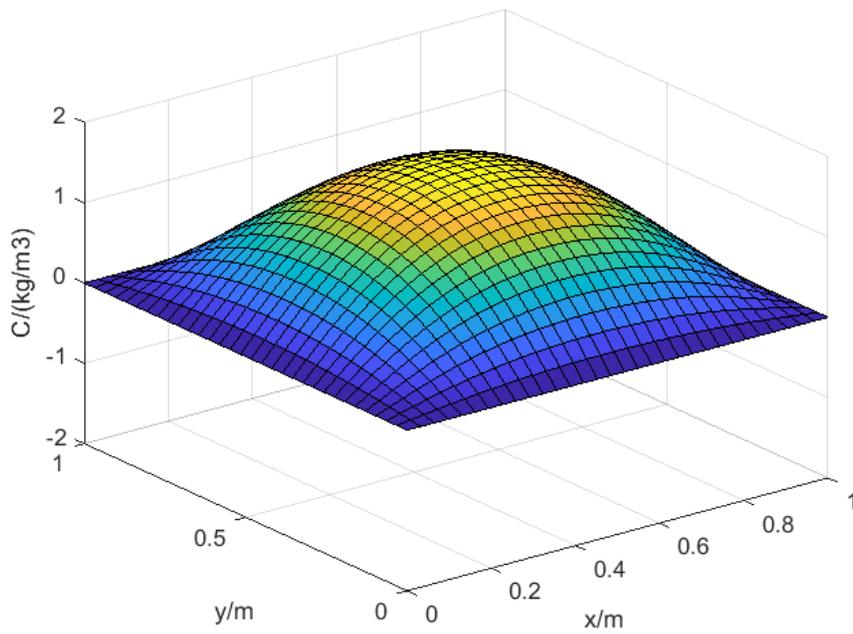


图 6.1 二维扩散仿真图

其中下  $x$ ,  $y$  表示为位置，竖坐标以及颜色表示浓度。可以看出浓度迅速向四周扩散，且非常连续。根据参考观测值验证扩散参数误差， $EMSR < 0.1$ ，模型仿真效果良好<sup>[11]</sup>。

## 7 模型评价与改进

### 7.1 模型优点

(1) 对于问题一先采用了欧拉法和多种拟合算法计算，避免单个算法不稳定的缺点。后利用吉洪诺夫正则化方法改良了回归计算，很好的规避了反问题参数识别普遍存在的过拟合，不适定性问题。

(2) 对于问题二采用有限差分法，成功将偏微分方程离散化处理，能对离散型数据进行求解。后又采用具有良好的鲁棒性的遗传算法进行迭代搜寻最优解，减少了迭代的次数，不会陷入局部最优解的陷阱中。

(3) 对于问题三对不同因素用不同的模型求解结果，最后利用总的评价标准去筛选主要影响因素。很好的解决了某些因素没有观测数据或者无法和其他因素在同一纬度进行筛选评价的问题。

(4) 对于问题四本为在未改变模型基本架构的基础上，将模型推广至高维和多元情况，模型具有普适性。

### 7.2 模型缺点

(1) 本文第一问模型对离散数据拟合成函数进行处理，增加了系统误差。

(2) 本文通过参考一维热传导过程建立，实际情况有一定的差异。

(3) 本文采用的有限差分法依赖于边界条件。

### 7.3 模型的改进

(1) 在线性回归中还可以采取其他正则化方法去规避过拟合、不适定性、数据量大等问题，例如 L1 参数正则化、向输出目标注入噪声等。

(2) 在求解扩散系数的过程中，使用遗传算法出现的结果数据较离散，如果数据样本较少可能出现非线性的情况，模型存在改良空间。

## 参考文献

- [1] 尹伟石,刘晓奇,徐轩.热源参数识别问题的 Bayes 遗传算法[J].吉林大学学报(理学版),2020,58(04):841-846.
- [2] Lassi Päivärinta,Erkki Somersalo. Inverse Problems in Mathematical Physics[M].Springer, Berlin, Heidelberg:2005.
- [3] 梁春叶,王桥明,孙远通,叶晓艳,曾宝莹.微分方程数值解之欧拉法在 MATLAB 下的应用[J].科技风,2021(10):71-72.DOI:10.19392/j.cnki.1671-7341.202110034.
- [4] 马敏,余浪,范文茹.基于 L1/L2 正则化 EIT 算法的 CFRP 损伤检测[J/OL].激光与光电子学进展:1-13[2022-08-27].
- [5] 崔成贤,李成林.热传导方程传热系数的识别方法[J].佳木斯工学院学报,1995(04):331-334.
- [6] 张博文.求解多维瞬态非线性热传导反问题的一种新方法[D].大连理工大学,2020.
- [7] 熊盛武,李元香,康立山,陈毓屏.用演化算法求解抛物型方程扩散系数的识别问题[J].计算机学报,2000(03):261-265.
- [8] 李守巨,刘迎曦.改进遗传算法在非线性热传导参数识别中的应用[J].工程力学,2005(03):72-75+87.
- [9] 吴士龙.流化床煤气化过程参数不确定性量化[J].天津化工,2022,36(01):92-95.
- [10] 孙培原.互联网金融上市企业数据资产价值评估研究[D].辽宁大学,2022.
- [11] 魏利.基于有限差分法快速测量随浓度变化的液相扩散系数研究[D].云南大学,2020.

## 附 录

### 附录 I: 主要程序/关键代码

```
%*****有限差分法代码*****%
clc,clear
date=xlsread('C.xlsx');
a=0.054;
dx=0.01;
x=0:dx:1;
dt=0.01;
t=0:dt:1;
u=zeros(length(x),length(t));
%行数和 x 的个数一样
u(:,1)=date(:,2);
u(:,end)=date(:,end);%x 的函数，初始函数，第一列
%边界进行插值
%已有边界条件
db=0.2;
b=0:db:1;
n1=date(1,2:7);
n2=date(101,2:7);
%插值后的边界条件
m1=interp1(b,n1,t,'spline');
m2=interp1(b,n2,t,'spline');
% plot(b,n1,'o',t,m1,':');
A=-2*eye(length(x))+diag(ones(1,length(x)-1),1)+diag(ones(1,length(x)-1),-1);
%diag(1)对角矩阵往上挪 1
for n=1:length(t)-1
    u(:,n+1)=u(:,n)+a^2*dt/dx^2*A*u(:,n);
    u(1,n+1)=m1(n+1);
    u(end,n+1)=m2(n+1);
end
uend=u(:,[1 21 41 61 81 101]);
[T,X]=meshgrid(t,x);%该命令生成网格
figure(1);
surf(X,T,u)%绘图
shading interp%处理色彩效果
xlabel('x/m')
ylabel('t/s')
zlabel('C/(kg/m3)')
```