КОМПЬЮТЕРНАЯ МАТЕМАТИКА

УДК 519.6

Н.А. ВАРЕНЮК

ЧИСЕЛЬНА ІДЕНТИФІКАЦІЯ ГРАДІЄНТНИМИ МЕТОДАМИ ЗАДАЧІ ДИФУЗІЇ РЕЧОВИНИ В НАНОПОРОВОМУ СЕРЕДОВИЩІ

Математическое моделирование

Розглянуто питання чисельної ідентифікації коефіцієнтів дифузії різномасштабної математичної задачі масопереносу в нанопоровому середовищі.

Вступ. Математичне моделювання дворівневого адсорбційного масопереносу в каталітичних середовищах частинок мікропористої структури та побудова розв'язків відповідних математичних моделей розглядалися в роботах [1– 6]. У роботі [4] на прикладі математичної моделі неусталеної дифузії моноречовини в нанопоровому середовищі отримано класичні задачі в слабкій постановці та явні вирази градієнта функціонала-нев'язки для ідентифікації градієнтними методами [7 – 9] різноманітних параметрів такої задачі. Алгоритм чисельного розв'язання прямої задачі за допомогою методу скінченних елементів (МСЕ) детально описано в [10]. У даній роботі розглядається чисельне розв'язання оберненеої задачі дифузії речовини в нанопоровому середовищі, зокрема випадок, коли невідомими виступають коефіцієнти дифузії.

Ідентифікація коефіцієнтів дифузії. Нехай, згідно [2, 5], концентрація $c(x,t)$ (кількість молекул/см^3) речовини, яка дифундує через пористу пластину товщини L, що складається з великої кількості сферичних пористих складових радіусу R $(0 < R << L < \infty)$, описується параболічним рівнянням

$$\varepsilon \frac{\partial c}{\partial t} = d_1 \varepsilon \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - 3(1-\varepsilon)\frac{d_2}{R}\left(\frac{\partial q}{\partial r}\right)\bigg|_{r=R}, \qquad (1)$$

де $r \in [0,R]$, $(x,t) \in \Omega_T$, $\Omega_T = (0,L)\times(0,T)$, ε – пористість; d_1, d_2 – коефіцієнти дифузії відповідно по макро- та мікропорах, q – концентрація речовини, яка дифундує по малих складових, (кількість молекул/см^3).

Дифузія речовини в сферичній складовій із центром у точці $x\in\Omega$ пористого середовища описується рівнянням

$$\frac{\partial q}{\partial t}=d_2\left(\frac{\partial^2 q}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial q}{\partial r}\right),\ r\in(0,R),\ t\in(0,T),\ x\in\Omega. \qquad (2)$$

Початкові умови:

$$c(x,t=0)=\varphi_1(x),\ q(r,x,t=0)=\varphi_2(r,x),\ x\in\Omega,\ r\in(0,R)\,. \qquad (3)$$

Крайові умови для концентрації $c(x,t)$:

$$c(x=l,t)=c_\infty(t),\ \left.\frac{\partial c}{\partial x}\right|_{x=0}=0,\ t\in(0,T)\,. \qquad (4)$$

Крайові умови в кожній точці $(x,t)\in\Omega_T$ для концентрації q:

$$\left.\frac{\partial q(r,x,t)}{\partial r}\right|_{r=0}=0,\ q(r=R,x,t)=p\,c(x,t),\ t\in(0,T),\ p=\text{const}>0. \qquad (5)$$

Нехай у задачі (1) – (5) коефіцієнти дифузії d_1, d_2 – невідомі параметри, а в деяких точках $\bar{d}_i\in(0,l)$ відомі концентрації c, q:

$$c(\bar{d}_i,\,t)=f_i^1(t),\quad q(0,\bar{d}_i,\,t)=f_i^2(t),\ t\in(0,T),\ i=\overline{1,m}. \qquad (6)$$

Зазначимо, що всі або деякі $\bar{d}_i$, в яких відомі значення концентрації c, q, можуть бути різними.

Задача (1) – (5), (6) полягає у визначенні коефіцієнтів d_1, d_2, при яких розв'язок $\bar{u}=(c,q)$ диференційної задачі (1) – (5) задовольняє рівності (6).

Функціонал-нев'язка записується у вигляді

$$J(u)=\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}\int_0^T\left((c(u;\bar{d}_i,t)-f_i^1(t))^2+(q(u;0,\bar{d}_i,t)-f_i^2(t))^2\right)dt, \qquad (7)$$

де $u=(u^1,u^2)\in\mathcal{U}=C_+([0,T])\times C_+([0,T]),\ C_+=\{v(t)\in C([0,T]):v>0\}$.

Побудова узагальненої задачі та наближеного узагальненого розв'язку для задачі (1) – (5) розглянуто в [4]. Алгоритм чисельного розв'язання прямої задачі (1) – (5) та результати розв'язання модельного прикладу описано в [10].

Розглянемо узагальнену задачу: визначити функцію $\bar{u}=(c(x,t), q(r,x,t))\in H$, яка $\forall z=(v,w)\in H_0$ задовольняє рівності

$$\left(\varepsilon\frac{\partial c}{\partial t},v\right)+\int_0^l\int_0^R r^2\frac{\partial q}{\partial t}w\,dr\,dx+\int_0^l d_1\varepsilon\frac{\partial c}{\partial x}\frac{\partial v}{\partial x}dx+\int_0^l\int_0^R r^2 d_2\frac{\partial q}{\partial r}\frac{\partial w}{\partial r}dr\,dx-$$

$$-\int_0^l r^2 d_2\left.\frac{\partial q}{\partial r}\right|_{r=R}w(R,x)dx+\frac{3(1-\varepsilon)}{R}d_2\int_0^l\left.\frac{\partial q}{\partial r}\right|_{r=R}v(x)\,dx=0,\ t\in(0,T). \qquad (8)$$

$$q(r,x,0)=0\,,\ r\in[0,R],\quad c(x,0)=0,\ x\in[0,l], \qquad (9)$$

$$q(R,\ x,t)=k\,c(x,t),\quad x\in(0,l),\ \ t\in(0,T)\,, \tag{10}$$

де

$$H=\Big\{\,\bar{u}=(c(x,t),\,q(r,x,t))\in H_1\times H_2:\ c(l,t)=c_\infty,\ \ q(R,\ x,\ t)=k\,c(x,t),$$

$$x\in(0,l),\ t\in(0,T)\Big\},\quad H_1=\left\{v(x,t):\int_0^T\!\!\int_0^l\left(v^2+\left(\frac{\partial v}{\partial t}\right)^2+\left(\frac{\partial v}{\partial x}\right)^2\right)dxdt<\infty\right\},$$

$$H_2=\left\{q(r,x,t):\int_0^T\!\!\int_0^l\!\!\int_0^R\left(q^2+\left(\frac{\partial q}{\partial t}\right)^2+\left(\frac{\partial q}{\partial r}\right)^2\right)drdxdt<\infty\right\}.$$

Замість задачі (1) – (5), (6) будемо розв’язувати узагальнену задачу (6), (8) – (10), яка полягає у знаходженні вектора u, при якому розв’язок задачі (8) – (10), де $d_1=u^1$, $d_2=u^2$, задовольняє рівності

$$J(u)=\inf_{v\in\mathscr{U}}J(v)\,. \tag{11}$$

Наближення u_{n+1} розв’язку $u\in\mathscr{U}$ задачі (6), (8) – (10) знаходимо за допомогою ітераційного процесу

$$u_{n+1}=u_n-\beta_n p_n,\quad n=0,1,\ldots,n^*, \tag{12}$$

який починається з деякого початкового наближення $u_0\in\mathscr{U}$, а напрямок спуску p_n і коефіцієнт β_n визначаються наступними виразами [8, 9]:

– для методу мінімальних похибок

$$p_n=J'_{u_n}\,,\ \beta_n=\frac{\|e_n\|^2}{\|J'_{u_n}\|^2}\,, \tag{13}$$

– для методу швидкого спуску

$$p_n=J'_{u_n}\,,\ \beta_n=\frac{\|J'_{u_n}\|^2}{\|AJ'_{u_n}\|^2}\,, \tag{14}$$

– для методу спряжених градієнтів

$$p_n=J'_{u_n}+\gamma_n p_{n-1},\ \gamma_0=0,\ \gamma_n=\frac{\|J'_{u_n}\|^2}{\|J'_{u_{n-1}}\|^2},\ \ \beta_n=\frac{\left(J'_{u_n},p_n\right)}{\|Ap_n\|^2}, \tag{15}$$

де J'_{u_n} – градієнт функціоналу $J(u)$ в точці $u=u_n$, $e_n=Au_n-f$, $Au_n=$ $=(\{c(u_n;\bar{d}_i,t)\}_{i=1}^m,\ \{q(u_n;0,\bar{d}_i,t)\}_{i=1}^m)$, $f=(f^1,\ f^2)$, $f^1=\{f_i^1\}_{i=1}^m$, $f^2=\{f_i^2\}_{i=1}^m$.

Обгрунтування ітераційного методу для розв’язання оберненої задачі наведено в [8, 9].

Використання одного з методів (11) – (13) потребує обчислення J'_{u_n} – значення градієнта функціонала (11). У роботах [4 – 7] показано зв'язок градієнта функціонала-нев'язки із розв'язком спряженої задачі та наведено його явний вигляд для різних типів обернених задач.

Для (6), (8) – (10) спряжена задача полягає у визначенні вектор-функції $(\psi_1,\psi_2)\in H^0$, що $\forall(w_1,w_2)\in H_0$ задовольняє системі тотожностей:

$$-\int_0^l \varepsilon\frac{\partial\psi_1}{\partial t}w_1dx-\int_0^l\int_0^R r^2\frac{\partial\psi_2}{\partial t}w_2drdx+\int_0^l u^1\varepsilon\frac{\partial\psi_1}{\partial x}\frac{\partial w_1}{\partial x}dx+\int_0^l\int_0^R r^2u^2\frac{\partial\psi_2}{\partial r}\frac{\partial w_2}{\partial r}drdx-$$
$$-\int_0^l r^2u^2\left.\frac{\partial w_2}{\partial r}\right|_{r=R}\psi_2(R,x,t)dx+\frac{3(1-\varepsilon)}{R}\int_0^l u^2\left.\frac{\partial w_2}{\partial r}\right|_{r=R}\psi_1dx= \quad (16)$$
$$=\sum_{i=1}^m\left((c(\bar d_i,t)-f_i^1(t))w_1(\bar d_i)+(q(0,\bar d_i,t)-f_i^2)w_2(\bar d_i)\right),\ \ t\in(0,T),$$

$$\psi_1(x,T)=0,\ \ \psi_2(r,x,T)=0,\ \ x\in\Omega,\ \ r\in(0,R). \quad (17)$$

В роботі [4] показано, що $J'_{u_n}\approx\tilde\psi_n=(\tilde\psi_n^1,\tilde\psi_n^2)$,

де

$$\tilde\psi_n=(\tilde\psi_n^1,\tilde\psi_n^2),\quad \tilde\psi_n^1=-\int_0^l\varepsilon\frac{\partial c}{\partial x}\frac{\partial\psi_1}{\partial x}dx,\quad \tilde\psi_n^2=-\int_0^l\int_0^R r^2\frac{\partial q}{\partial r}\frac{\partial\psi_2}{\partial r}drdx+$$
$$+\int_0^l r^2\left.\frac{\partial q}{\partial r}\right|_{r=R}\psi_2(R,x,t)dx-\frac{3(1-\varepsilon)}{R}\int_0^l\left.\frac{\partial q}{\partial r}\right|_{r=R}\psi_1(x,t)dx,\ \ \left\|J'_{u_n}\right\|^2\approx\int_0^T\sum_{i=1}^2(\tilde\psi_n^i)^2dt.$$

Алгоритм розв'язання задачі. Для розв'язання оберненої задачі (1) – (6) використовувався алгоритм.

В ітераційному процесі (12) покладаємо $n=0$.

1. Покладається початкове наближення шуканого значення $u=u_0$. Методи вибору початкового наближення описані в [8].

2. Розв'язується пряма задача (1) – (5), де $u=u_n$ і обчислюються значення $c(u_n;\bar d_i,t)$, $q(u_n;\bar d_i,t)$, $i=\overline{1,m}$, $t\in(0,T]$.

3. Розв'язується спряжена задача (16) – (17), отримується розв'язок $\tilde\psi_n=(\tilde\psi_n^1,\tilde\psi_n^2)$.

4. Обчислюється градієнт J'_{u_n} та $\left\|J'_{u_n}\right\|$.

5. В залежності від вибраного методу:

5.1. Для методу (13) обчислюється

$$\|e_n\|=\left(\sum_{i=1}^m\int_0^T\left((c(u;\bar d_i,t)-f_i^1(t))^2+(q(u;0,\bar d_i,t)-f_i^2(t))^2\right)dt\right)^{1/2}.$$

5.2. Для методу (14) покладається $u_n = J'_{u_n}$ і розв'язується пряма задача (1) – (5). В результаті отримаємо розв'язок $AJ'_{u_n} = (\{c(J'_{u_n}; \bar{d}_i, t)\}_{i=1}^{m}$, $\{q(J'_{u_n}; 0, \bar{d}_i, t)\}_{i=1}^{m})$, $i = \overline{1, m}$, $t \in (0, T]$.

5.3. Для методу (15) при $n = 0$ виконується 5.3.1, при $n \neq 0$ – 5.3.2.

5.3.1. Покладається $u = p_n$, розв'язується пряма задача (1) – (5). В результаті отримаємо $Ap_n = (\{c(p_n; \bar{d}_i, t)\}_{i=1}^{m}, \{q(p_n; 0, \bar{d}_i, t)\}_{i=1}^{m})$, $i = \overline{1, m}$, $t \in (0, T]$. Обчислюються $\left(J'_{u_n}, p_n\right) = \int_0^T \int_\Omega J'_{u_n} p_n d\Omega dt$, $\quad_n$, запам'ятовуються значення J'_{u_n} та p_n для наступної ітерації.

5.3.2. Обчислюється γ_n, p_n, виконується перехід на крок 5.3.1.

6. Обчислюється u_{n+1}.

7. Знаходиться значення $E = \|u_{n+1} - u_n\|$.

7.1. Якщо $E < \varepsilon$, де ε – досить мале число, то u_{n+1} – розв'язок і перехід до 8.

7.2. Якщо $E > \varepsilon$ покладається $n = n + 1$ та здійснюється перехід до 2.

8. Кінець.

Розв'язання модельного прикладу. В області $\Omega = (0;\ 2) \times (0;\ 0.2)$, $\Omega_T = \Omega \times (0;\ 40)$ для $t \in (0, 40)$, $x \in (0;\ 2)$, $r \in (0;\ 0.2)$ розглядається задача (1) – (5) із наступними значеннями параметрів: пористість $\varepsilon = 0.5$; крайові умови $c(2, t) = 4.02 + t$, $\left.\frac{\partial c}{\partial x}\right|_{x=0} = 0$, $\left.\frac{\partial q(r, x, t)}{\partial r}\right|_{r=0} = 0$, $q(0.2, x, t) = 2c(x, t)$; початкові умови: $c(x, 0) = x^2 + 0.02$, $q(r, x, 0) = 2x^2 + r^2$, коефіцієнти дифузії d_1, d_2 – невідомі шукані параметри. Відомо, що у точках $\bar{d}_0 = 0.2$, $\bar{d}_1 = 0.6$ концентрація речовини має такі значення: $c(0.2, t) = 0.06 + t$, $q(0, 0.2, t) = 0.08 + 2t$, $c(0.6, t) =$ $= 0.38 + t$, $q(0, 0.6, t) = 0.72 + 2t$, $t \in (0, 40)$.

Точний розв'язок задачі з такими умовами має вигляд $c(x, t) = x^2 + t + 0.02 \left(\frac{\text{к-сть молек.}}{\text{см}^3}\right)$, $q(r, x, t) = 2x^2 + r^2 + 2t \left(\frac{\text{к-сть молек.}}{\text{см}^3}\right)$.

На кожному кроці ітераційного процесу пряма та відповідна обернена задачі розв'язувалися з використанням квадратичних функцій МСЕ з $h_c = 0.2$ – крок дискретизації по відрізку $[0, L]$, та $h_q = 0.1$ – крок дискретизації по відрізку [0, R]. Часовий відрізок розбивався із кроком $h_t = 0.1$. Відповідні задачі Коші розв'язано за допомогою схеми Кранка – Ніколсона. Обернена задача розв'язувалася за допомогою ітераційних методів (13)–(15). В таблиці наведено результати розв'язання оберненої задачі із відновлення коефіцієнтів d_1, d_2, де n – номер завершення ітераційного процесу, $\delta = \left|(u_T - u_H) / u_T\right| \cdot 100\%$ – відносна похибка отриманого розв'язку, $u_T \neq 0$, $\|l_n\|$ – нев'язка.

ТАБЛИЦЯ

Метод минімальних похибок	Метод швидкісного спуску	Метод спряжених градієнтів
n = 16	n = 58369	n = 45237
$\delta\% = 5.6 \cdot 10^{-4}\%$	$\delta\% = 3.8 \cdot 10^{-3}$	$\delta\% = 6.4 \cdot 10^{-2}$
$\|l_n\| = 6.8 \cdot 10^{-11}$	$\|l_n\| = 2.2 \cdot 10^{-2}$	$\|l_n\| = 4.3 \cdot 10^{-6}$

Висновок. У роботі розглянуто чисельне розв'язання оберненеої задачі дифузії речовини в нанопоровому середовищі. Наведено алгоритм розв'язання для випадку, коли невідомими виступають коефіцієнти дифузії. Різномасштабна диференційна математична постановка задачі наведена у [4, 5]. Наведено результати чисельного експерименту для модельного прикладу.

Н.А. Варенюк

ЧИСЛЕННАЯ ИДЕНТИФИКАЦИЯ ГРАДИЕНТНЫМИ МЕТОДАМИ
ЗАДАЧИ ДИФФУЗИИ ВЕЩЕСТВА В НАНОПОРИСТОЙ СРЕДЕ

Рассмотрен вопрос численной идентификации коэффициентов диффузии разномасштабной математической задачи масопереносса в нанопористой среде.

N.A. Vareniuk

NUMERICAL IDENTIFICATION BY GRADIENT METHODS
OF DIFFUSION PROBLEMS OF A SUBSTANCE IN NANOPOROUS MEDIA

The problem of diffusion coefficients numerical identification of the multiscale mathematical problem of mass transfer in a nanoporous media is considered.

1. Петрик М.Р., Фрессард Ж. Математическое моделирование и визуализация системы многоуровневого массопереноса в неоднородных каталитических средах нанопористых частиц. *Проблемы управления и информатики*. 2008. № 5. С. 25 –52.
2. Дейнека В.С., Петрик М.Р., Кане Д., Фрессард Ж. Математичне моделювання та ідентифікація параметрів масопереносу в неоднорідних і нанопористих середовищах (адсорбція, компетитивна дифузія). Киев: НАНУ, 2013. 177 с.
3. Дейнека В.С., Петрик М.Р., Михалик Д.М. Идентификация кинетических параметров однокомпонентного адсорбционного массопереноса в микропористых каталических средах. *Проблемы управления и информатики*. 2011. № 2. С. 12 –25.

4. Сергиенко И.В., Дейнека В.С. Идентификация градиентными методами параметров задач диффузии вещества в нанопористой среде. *Проблемы управления и информатики*. 2010. № 6. С. 5 –18.
5. Сергиенко И.В., Дейнека В.С. Идентификация градиентными методами параметров задач диффузии двухкомпонентного вещества в нанопористых средах. Доповіді НАНУ. 2010. № 12. С. 42–49.
6. Дейнека В.С. Идентификация параметров задач массопереноса в нанопористых средах при известных суммарных распределениях массы. Доповіді НАНУ. 2013. № 4. С. 26–32.
7. Сергиенко И.В. Дейнека В.С. Системный анализ многокомпонентных распределенных систем. К.: Наукова думка, 2009. 640 с.
8. Алифанов О.М. Обратные задачи теплообмена. М.: Машиностроение, 1988. 280 с.
9. Алифанов О.М., Артюхин Е.А., Румянцев С.В. Экстремальные методы решения некорректных задач. М.: Наука, 1988. 288 с.
10. Вєщунова Н.А. Чисельне розв’язання задачі масопереносу в нанопористих середовищах. *Компьютерная математика*. 2014. № 2. С. 38–47.

Одержано 06.12.2017

Про автора:

Варенюк Наталія Анатоліївна,
кандидат фізико-математичних наук, старший науковий співробітник
Інституту кібернетики імені В.М. Глушкова НАН України.
E-mail: nvareniuk@ukr.net