Доповіді
національної
академії наук
України

4 • 2013

УДК 519.6

Академик НАН Украины **В. С. Дейнека**

Идентификация параметров задач массопереноса в нанопористых средах при известных суммарных распределениях массы

На основании результатов теории оптимального управления состояниями многокомпонентных распределенных систем получены явные выражения градиентов функционалов-невязок идентификации параметров наноматериалов с наблюдениями за суммарными концентрациями сорбируемых смесей.

В различных областях (медицине, нефтехимии, авиации и др.) широко используются наноматериалы. Применение средств математического моделирования к исследованию процессов массопереноса в наноматериалах позволяет создавать изделия, обеспечивающие высокое качество конечной продукции, например, высокую степень очистки нефтепродуктов, питьевой воды и др. Сложность широкого внедрения современных компьютерных средств для исследования процессов в таких средах состоит не только в сложности построения адекватных математических моделей, но и в задании их параметров. Ранее в работах [1–3] рассматривались вопросы идентификации параметров задач массопереноса в нанопористых средах при известных распределениях масс вещества в твердой и жидкой фазах. Однако, в силу сложности экспериментального разделения этих характеристик, целесообразно использовать эффективные вычислительные алгоритмы идентификации параметров при известных суммарных массах (в твердой и жидкой фазах) в определенных направлениях зондирования исследуемых материалов.

В данной работе рассматривается вопрос построения явных выражений градиентов функционалов-невязок для идентификации параметров задач массопереноса в нанопористых средах при известных суммарных распределениях массы в твердой и жидкой фазах сорбируемого вещества.

Дифференциальная математическая модель массопереноса. Концентрация $c(x,t)$ вещества, диффундирующего через пористую пластину толщиной l, состоящую из большого числа сферических пористых составляющих радиусом R ($0 < R \ll l < \infty$), описывается параболическим уравнением [4]

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

где $\Omega = (0,l)$, $\Omega_T = \Omega\times(0,T)$; ε — пористость; d_1, d_2 — коэффициенты диффузии соответственно по макропорам и микрочастицам; q — концентрация диффундирующего вещества по малым сферическим составляющим.

Диффузия вещества в сферических составляющих радиусом R с центром в точке $x\in\Omega$ пористой среды описывается уравнением

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

Начальные условия приняты однородными:

$$c(x,t=0) = 0, \qquad q(r,x,t=0) = 0, \qquad x\in\Omega, \qquad r\in(0,R). \tag{3}$$

Краевые условия для концентрации c следующие:

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

Краевые условия в каждой точке $(x,t)\in\Omega_T$ для концентрации q такие:

$$\frac{\partial q(r,x,t)}{\partial r}\bigg|_{r=0} = 0, \qquad q(r=R,x,t) = kc(x,t), \qquad t\in(0,T), \tag{5}$$

где k — некоторый коэффициент ($k = k(t) > 0$).

Следуя [1], обобщенным решением начально-краевой задачи (1)–(5) назовем вектор-функцию $U = (c,q)\in H_1\times H_2$, которая $\forall\,(v,w)\in H_{10}\times H_{20}$ удовлетворяет равенствам

$$\begin{aligned}
&\left(\varepsilon\frac{\partial c}{\partial t}, v\right) + a_1(c,v) = l_1(q,v), \qquad t\in(0,T),\\
&\int\limits_0^R r^2\frac{\partial q}{\partial t}w\,dr + a_2(q,w) = 0, \qquad x\in(0,l), \qquad t\in(0,T),\\
&c(x,0) = 0, \qquad q(r,x,0) = 0, \qquad r\in(0,R), \qquad x\in(0,l),\\
&q(r=R,x,t) = kc(x,t), \qquad x\in(0,l), \qquad t\in(0,T),
\end{aligned} \tag{6}$$

где

$$H_1 = \left\{v(x,t)\in L^2(0,T;W_2^1(0,l))\colon \frac{\partial v}{\partial t}\in L^2(0,T;L_2(0,l)),\ v(x=l,t) = c_\infty,\ t\in(0,T)\right\},$$

$$H_2 = \left\{v(r,x,t)\in L^2(0,T;0,l;W_2^1(0,R))\colon \frac{\partial v}{\partial t}\in L^2(0,T;0,l;L_2(0,R))\right\},$$

$$L^2(0,T;0,l;W_2^1(0,R)) = \left\{ v(r,x,t)\colon \int\limits_0^T \int\limits_0^l \|v\|^2_{W_2^1(0,R)} dxdt < \infty \right\},$$

$$H_{10} = \{v(x) \in W_2^1(0,l)\colon v(l) = 0\}, \qquad H_{20} = \{w(r) \in W_2^1(0,R),\ w(R) = 0\},$$

$$a_1(c,v) = \left(d_1 \varepsilon \frac{\partial c}{\partial x}, \frac{\partial v}{\partial x} \right), \qquad l_1(q,v) = -\frac{3(1-\varepsilon)}{R} \int\limits_0^l d_2 \left(\frac{\partial q}{\partial r} \right)\Big|_{r=R} v(x)\, dx,$$

$$a_2(q,w) = \int\limits_0^R d_2 r^2 \frac{\partial q}{\partial r} \frac{\partial w}{\partial r} dr.$$

Идентификация коэффициентов диффузии. Пусть в задаче (1)–(5) коэффициенты диффузии d_1, d_2 неизвестны. При этом предполагаем, что в некоторых точках $\overline{d}_i \in (0,l)$, $i = \overline{1,m}$, известны суммарные значения концентрации

$$m\big|_{x=\overline{d}_i} = (c+q)\big|_{x=\overline{d}_i} = f_i(t), \qquad i = \overline{1,m}, \qquad t \in (0,T). \tag{7}$$

Тем самым получена задача (6), (7), состоящая в определении вектор-функции $u = (u^1, u^2) \in \in \mathcal{U} = C_+([0,T]) \times C_+([0,T])$, $C_+([0,T]) = \{v(t) \in C([0,T])\colon v > 0,\ t \in [0,T]\}$, при которой решение $U = (c,q)$ задачи (6) удовлетворяет равенствам (7), где $d_1 = u^1$, $d_2 = u^2$.

Замечание 1. В силу особенностей постановки начально-краевой задачи (1)–(5) возникает вопрос в том, что подразумевать под выражением $q\big|_{x=\overline{d}_i}$ в равенстве (7). Возможны некоторые предположения относительно того, к какой точке $r \in [0,R]$ привязать значения $q\big|_{x=\overline{d}_i}$, например, можно положить $q\big|_{x=\overline{d}_i} = q(R/2, \overline{d}_i, t)$ или $q\big|_{x=\overline{d}_i} = q(R, \overline{d}_i, t)$.

Полагая

$$(c+q)\big|_{x=\overline{d}_i} = c(\overline{d}_i, t) + q\left(\frac{R}{2}, \overline{d}_i, t\right), \qquad i = \overline{1,m},$$

можем составить функционал-невязку

$$J(u) = \sum_{i=1}^m \frac{1}{2} \int\limits_0^T \left(c(\overline{d}_i,t) + q\left(\frac{R}{2}, \overline{d}_i, t\right) - f_i(t) \right)^2 dt. \tag{8}$$

В этом случае вместо задачи (6), (7) будем решать задачу (6), (8), состоящую в определении вектор-функции $u = (u^1, u^2) \in \mathcal{U}$, при которой решение $U = (c,q)$ задачи (6) минимизирует на $\mathcal{U}$ функционал (8).

Приближение u_{n+1} решения $u \in \mathcal{U}$ задачи (6), (8) будем находить с помощью градиентного метода

$$u_{n+1} = u_n - \beta_n p_n, \qquad n = 0, 1, \ldots, n^*, \tag{9}$$

начиная с некоторого начального приближения $u_0 \in \mathcal{U}$, где направление спуска p_n и коэффициент β_n определяются следующими выражениями [5]:

для метода минимальных ошибок

$$p_n = J'_{u_n}, \qquad \beta_n = \frac{\|e_n\|^2}{\|J'_{u_n}\|^2}, \tag{10}$$

для метода скорейшего спуска

$$p_n = J'_{u_n}, \qquad \beta_n = \frac{\|J'_{u_n}\|^2}{\|AJ'_{u_n}\|^2}, \tag{11}$$

для метода сопряженных градиентов

$$p_n = J'_{u_n} + \gamma_n p_{n-1}, \qquad \gamma_0 = 0, \qquad \gamma_n = \frac{\|J'_{u_n}\|^2}{\|J'_{u_{n-1}}\|^2}, \qquad \beta_n = \frac{(J'_{u_n}, p_n)}{\|Ap_n\|^2}, \tag{12}$$

где J'_{u_n} — градиент функционала $J(u)$ в точке $u = u_n$, $e_n = Au_n - f$, $Au_n = (\{c(u_n; \overline{d}_i, t) + q(u_n; R/2, \overline{d}_i, t)\}_{i=1}^m)$, $f = \{f_i(t)\}_{i=1}^m$.

Обозначим

$$\pi(u, v) = (\overline{Y}(u) - \overline{Y}(u_n), \overline{Y}(v) - \overline{Y}(u_n)), \qquad L(v) = (f - \overline{Y}(u_n), \overline{Y}(v) - \overline{Y}(u_n)),$$

где $\overline{Y}(v) = Av$.

Справедливо равенство

$$2J(v) = \pi(v, v) - 2L(v) + \|f - \overline{Y}(u_n)\|^2. \tag{12$'$}$$

Пренебрегая членами второго порядка малости, для определения приращения $\theta = \Delta U = (\Delta c, \Delta q)$ решения $U = (c, q)$ задачи (6), соответствующего приращению Δu вектора u, получаем задачу:

$$\begin{aligned}
&\left(\varepsilon \frac{\partial \Delta c}{\partial t}, v\right) + \overline{a}_1(u_1; \Delta c, v) = -\overline{a}_1(\Delta u^1; c, v) + \overline{l}_1(u_2; \Delta q, v) + \overline{l}_1(\Delta u_2; q, v), \quad t \in (0, T),\\
&\int\limits_0^R r^2 \frac{\partial \Delta q}{\partial t} w dr + \overline{a}_2(u_2; \Delta q, w) = -\overline{a}_2(\Delta u^2; q, w), \qquad t \in (0, T),\\
&\Delta c(x, 0) = 0, \qquad \Delta q(r, x, 0) = 0, \qquad r \in (0, R), \qquad x \in (0, l),\\
&\Delta q(r = R, x, t) = k\Delta c(x, t), \qquad x \in (0, l), \qquad t \in (0, T),
\end{aligned} \tag{13}$$

где

$$\theta = (\Delta c, \Delta q) \in H_1^0 \times H_2, \qquad \forall\, (v, w) \in H_{10} \times H_{20},$$

$$\overline{a}_1(z; c, v) = \left(z\varepsilon \frac{\partial c}{\partial x}, \frac{\partial v}{\partial x}\right), \qquad \overline{a}_2(z; q, w) = \int\limits_0^R r^2 z \frac{\partial q}{\partial r} \frac{\partial w}{\partial r} dr,$$

$$H_1^0 = \left\{v(x, t) \in L^2(0, T; W_2^1(0, l))\colon \frac{\partial v}{\partial t} \in L^2(0, T; L_2(0, l)),\ v(x = l, t) = 0,\ t \in (0, T)\right\},$$

$$\overline{l}_1(z, \Delta q, v) = -\frac{3(1 - \varepsilon)}{R} \int\limits_0^l z \frac{\partial \Delta q}{\partial r}\bigg|_{r=R} v dx.$$

Пусть $u_n+\Delta u_n \in \mathcal{U}$. Тогда $\forall\, \lambda \in (0,1)$ $u_n+\lambda\Delta u_n \in \mathcal{U}$. Если обозначим $\widetilde{U}(u_{n+1}) = U(u_n)+$ $+\theta$, где θ — решение задачи (13) при $U = U(u_n)$, $\Delta u = \Delta u_n$, то, пренебрегая членами второго порядка малости, при переходе от задачи (6) к задаче (13) получаем $U(u_{n+1}) \approx \widetilde{U}(u_{n+1})$ и

$$\overline{Y}(u_n + \lambda\Delta u_n) - \overline{Y}(u_n) \approx \lambda(\overline{\overline{Y}}(u_{n+1}) - \overline{Y}(u_n)), \tag{14}$$

где $\overline{\overline{Y}}(u_{n+1}) = \{\widetilde{c}(u_{n+1}; \overline{d}_i, t) + \widetilde{q}(u_{n+1}; R/2, \overline{d}_i, t)\}_{i=1}^m$.

Поскольку

$$J(u_n + \lambda\Delta u_n) = \pi(u_n + \lambda\Delta u_n, u_n + \lambda\Delta u_n) - L(u_n + \lambda\Delta u_n) + \|\overline{Y}(u_n) - f\|^2,$$

то с учетом (12′), (14) имеем

$$\langle J'_{u_n}, \Delta u_n\rangle = \lim_{\lambda\to 0}\frac{J(u_n + \lambda\Delta u_n) - J(u_n)}{\lambda} \approx (\overline{Y}(u_n) - f, \overline{\overline{Y}}(u_{n+1}) - \overline{Y}(u_n)). \tag{15}$$

На каждом шаге итерационного процесса (9) на основе [6], следуя [7], введем в рассмотрение сопряженную задачу, состоящую в определении вектор-функции $\psi =$ $= (\psi^1(x,t), \psi^2(r,x,t))$, удовлетворяющей равенствам

$$-\varepsilon\frac{\partial\psi^1}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\left(u_n^1\varepsilon\frac{\partial\psi^1}{\partial x}\right) + \sum_{i=1}^m\left(c(u_n;\overline{d}_i,t) + q\left(u_n;\frac{R}{2},\overline{d}_i,t\right) - f_i\right)\delta(x-\overline{d}_i), \quad t\in(0,T),$$

$$-\int_0^R r^2\frac{\partial\psi^2}{\partial t}w dr + \int_0^R r^2u_n^2\frac{\partial\psi^2}{\partial r}\frac{\partial w}{\partial r}dr + \left(3(1-\varepsilon)\frac{u_n^2}{R}\frac{\partial w}{\partial r}\bigg|_{r=R}\psi^1\right) =$$

$$= \sum_{i=1}^m\left(c(u_n;\overline{d}_i,t) + q(u_n;\frac{R}{2},\overline{d}_i,t)\right)w\left(\frac{R}{2}\right)\delta(x-\overline{d}_i), \qquad x\in(0,l), \tag{16}$$

$$\psi^1(x,t=T) = 0, \qquad x\in(0,l), \qquad \psi^2(r,x,t=T) = 0, \qquad r\in(0,R),$$

$$\psi^1(x=l,t) = 0, \qquad \frac{\partial\psi^1}{\partial x}\bigg|_{x=0} = 0, \qquad \frac{\partial\psi^2}{\partial r}\bigg|_{r=0} = 0, \qquad \psi^2(r=R,x,t) = k\psi^1(x,t).$$

Определение. Обобщенным решением задачи (16) называется вектор-функция $\psi =$ $= (\psi^1(x,t), \psi^2(r,x,t)) \in H_1^0\times H_2$, которая $\forall\,(v,w)\in H_{10}\times H_{20}$ удовлетворяет равенствам

$$-\int_0^l \varepsilon\frac{\partial\psi^1}{\partial t}v\,dx + \int_0^l u_n^1\varepsilon\frac{\partial\psi^1}{\partial x}\frac{\partial v}{\partial x}dx = \sum_{i=1}^m\left(c(u_n;\overline{d}_i,t) + q(u_n;\frac{R}{2},\overline{d}_i,t) - f_i\right)v(\overline{d}_i),$$

$$t\in(0,T),$$

$$-\int_0^R r^2\frac{\partial\psi^2}{\partial t}w\,dr + \int_0^R r^2u_n^2\frac{\partial\psi^2}{\partial r}\frac{\partial w}{\partial r}dr + \left(3(1-\varepsilon)\frac{u_2}{R}\frac{\partial w}{\partial r}\bigg|_{r=R}\psi^1\right) = \tag{17}$$

$$= \sum_{i=1}^m\left(c(u_n;\overline{d}_i,t) + q\left(u_n;\frac{R}{2},\overline{d}_i,t\right)\right)w\left(\frac{R}{2}\right)\delta(x-\overline{d}_i), \quad x\in(0,l), \quad t\in(0,T).$$

Полагая $v = \widetilde{c}(u_{n+1}; x,t) - c(u_n; x,t)$, $w = \widetilde{q}(u_{n+1}; r,x,t) - q(u_n; r,x,t)$, с учетом (6), (13) получаем

$$\langle J'_{u_n}, \Delta u\rangle \approx -\int\limits_0^T \overline{a}_1(\Delta u_n^1; c, \psi^1)\,dt + \int\limits_0^T \overline{l}_1(\Delta u_n^2; q, \psi^1)\,dt - \int\limits_0^T\int\limits_0^l \overline{a}_2(\Delta u_n^2; q, \psi^2)\,dxdt. \qquad (18)$$

Следовательно, $J'_{u_n} \approx \widetilde{\psi}_n$, где

$$\begin{gathered}\widetilde{\psi}_n = (\widetilde{\psi}_n^1, \widetilde{\psi}_n^2), \qquad \widetilde{\psi}_n^1 = -\varepsilon\frac{\partial c}{\partial x}\frac{\partial \psi^1}{\partial x},\\ \widetilde{\psi}_n^2 = -\frac{3(1-\varepsilon)}{R}\frac{\partial q}{\partial r}\bigg|_{r=R}\psi^1\delta(r-R) - r^2\frac{\partial q}{\partial r}\frac{\partial \psi^2}{\partial r},\\ \|J'_{u_n}\|^2 \approx \int\limits_0^T\int\limits_0^l (\widetilde{\psi}_n^1)^2 dxdt + \int\limits_0^T\int\limits_0^l\int\limits_0^R \widetilde{\psi}_n^2 drdxdt.\end{gathered} \qquad (19)$$

Замечание 2. Если $d_1 = d_1(x)$, $d_2 = d_2(x)$, то

$$\widetilde{\psi}_n^1 = -\int\limits_0^T \varepsilon\frac{\partial c}{\partial x}\frac{\partial \psi^1}{\partial x}dt, \qquad \widetilde{\psi}_n^2 = -\int\limits_0^T\int\limits_0^R \widetilde{\psi}_n^2 drdt, \qquad \|J'_{u_n}\|^2 \approx \int\limits_0^l ((\widetilde{\psi}_n^1)^2 + (\widetilde{\psi}_n^2)^2)\,dx.$$

Если предположим, что $q\big|_{x=\overline{d}_i} = q(R,x,t)$, то функционал-невязка имеет вид

$$J(u) = \sum_{i=1}^m \frac{1}{2}\int\limits_0^T \Big(c(\overline{d}_i, t) + q(R, \overline{d}_i, t) - f_i(t)\Big)^2 dt.$$

В этом случае на каждом шаге итерационного процесса (9) сопряженная задача состоит в нахождении вектор-функции $\psi = (\psi^1, \psi^2) \in H_1^0 \times H_2$, которая $\forall\,(v,w) \in H_{10} \times H_{20}$ удовлетворяет равенствам

$$-\int\limits_0^l \varepsilon\frac{\partial \psi^1}{\partial t}vdx + \int\limits_0^l u_n^1\varepsilon\frac{\partial \psi^1}{\partial x}\frac{\partial v}{\partial x}dx = \sum_{i=1}^m (c(u_n; \overline{d}_i, t) + q(u_n; R, \overline{d}_i, t) - f_i)v(\overline{d}_i), \quad t \in (0,T),$$

$$-\int\limits_0^R r^2\frac{\partial \psi^2}{\partial t}wdr + \int\limits_0^R r^2 u_n^2\frac{\partial \psi^2}{\partial r}\frac{\partial w}{\partial r}dr + \left(3(1-\varepsilon)\frac{u_2}{R}\frac{\partial w}{\partial r}\bigg|_{r=R}\psi^1\right) =$$

$$= \sum_{i=1}^m (c(u_n; \overline{d}_i, t) + q(u_n; R, \overline{d}_i, t) - f_i)w(\overline{d}_i)\delta(x - \overline{d}_i), \qquad x \in (0,l), \qquad t \in (0,T).$$

Полагая $v = \widetilde{c}(u_{n+1}; x,t) - c(u_n; x,t)$, $w = \widetilde{q}(u_{n+1}; r,x,t) - q(u_n; r,x,t)$, с учетом (6), (13) получаем выражение (18), из которого следуют выражения (19) для приближения составляющих градиента J'_{u_n}.

Замечание 3. Если восстанавливается лишь d_1 при известном d_2, имеем $J'_{u_n} \approx \widetilde{\psi}_n^1$. Если восстанавливается параметр d_2, то имеем $J'_{u_n} \approx \widetilde{\psi}_n^2$.

1. *Сергиенко И. В., Дейнека В. С.* Идентификация градиентными методами параметров задач диффузии вещества в нанопористой среде // Пробл. управления и информатики. – 2010. – № 6. – С. 5–18.
2. *Сергиенко И. В., Дейнека В. С.* Идентификация градиентными методами параметров задач диффузии двухкомпонентного вещества в нанопористых средах // Доп. НАН України. – 2010. – № 12. – С. 42–49.
3. *Дейнека В. С., Петрик М. Р., Фрессард Ж.* Идентификация кинетических параметров массопереноса в составляющих многокомпонентных неоднородных нанопористых сред системы компетитивной диффузии // Кибернетика и систем. анализ. – 2011. – № 5. – С. 46–64.
4. *Kärger J., Ruthven D.* Diffusion and adsorption in porous solids // Handbook of Porous Solids // Ed. by F. Shuth, K. W. Sing and J. Weitkamp. – Weinheim: Wiley-VCH, 2002. – P. 2089–2173.
5. *Алифанов О. М., Артюхин Е. А., Румянцев С. В.* Экстремальные методы решения некорректных задач. – Москва: Наука, 1988. – 288 с.
6. *Sergienko I. V., Deineka V. S.* Optimal control of distributed systems with conjugation conditions. – New York: Kluwer Academic Publishers, 2005. – 400 p.
7. *Сергиенко И. В. Дейнека В. С.* Системный анализ многокомпонентных распределенных систем. – Киев: Наук. думка, 2009. – 640 с.

Институт кибернетики им. В. М. Глушкова
НАН Украины, Киев

Поступило в редакцию 03.10.2012

Академік НАН України **В. С. Дейнека**

Ідентифікація параметрів задач масопереносу в нанопористих середовищах при відомих сумарних розподілах маси

На основі результатів теорії оптимального керування станами багатокомпонентних розподілених систем отримані явні вирази градієнтів функціоналів-нев'язок ідентифікації параметрів наноматеріалів зі спостереженнями за сумарними концентраціями сорбуючих сумішей.

Academician of the NAS of Ukraine **V. S. Deineka**

Parameter identification of mass transfer problems in nanoporous media under condition of known total mass distributions

On the basis of the theory of optimal control of states of multicomponent distributed systems, the explicit expressions for gradients of functionals-residuals for the identification of parameters of nanomaterials with observations of the total concentrations of sorbed mixtures are obtained.