УДК 519.6

Академик НАН Украины **И. В. Сергиенко,**
академик НАН Украины **В. С. Дейнека**

Идентификация градиентными методами параметров задач диффузии двухкомпонентных веществ в нанопористых средах

На основі результатів теорії оптимального керування станами багатокомпонентних розподілених систем отримані явні вирази градієнтів функціоналів-нев'язок для ідентифікації параметрів дифузії та сорбції двокомпонентних речовин в нанопористих середовищах.

В настоящее время в различных областях (медицине, нефтехимии и др.) широко используются нанопористые материалы, в которых массоперенос имеет сложный характер, где происходит взаимовлияние движущегося вещества по межчастичному поровому пространству и по поровому пространству достаточно мелких с большими сорбционными свойствами составляющих пористой среды.

Вопросы математического моделирования массопереноса в нанопористых средах рассматривались, например, в работах [1–4 и др.].

В данной работе на примере задачи диффузии двухкомпонентного вещества в нанопористой среде на основе результатов теории оптимального управления состояниями распределенных систем [5, 6], а также на основе [7] получены явные выражения градиентов функционалов-невязок для идентификации градиентными методами [8] различных параметров рассматриваемых задач.

1. Дифференциальная разномасштабная разноразмерная математическая модель. Учитывая [4], математическую модель диффузии двухкомпонентного вещества в слоистой нанопористой пластине запишем так. В каждой из областей Ω_{mT} концентрации $U_1(t,x)$, $U_2(t,x)$ двухкомпонентного вещества, диффундирующего по макропорам, удовлетворяют системе равенств

$$\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix} U_1(t,x) \\ U_2(t,x)\end{pmatrix} = \frac{\partial}{\partial x}\left(D_{\text{inter}}\frac{\partial}{\partial x}\begin{pmatrix} U_1(t,x) \\ U_2(t,x)\end{pmatrix}\right) - \frac{1}{R_m}D_{\text{intra}}\frac{\partial}{\partial r}\begin{pmatrix} q_1(t,r,x) \\ q_2(t,r,x)\end{pmatrix}\Bigg|_{r=R_m}, \tag{1}$$
$$r\in(0,R_m),\qquad (t,x)\in\Omega_{m_T},\qquad m=\overline{1,n+1},$$

где $\Omega_m = (l_{m-1}, l_m)$, $0 = l_0 < l_1 < \cdots < l_{m+1} = l < \infty$; l — толщина пластины; $t \in (0,T)$; $\Omega_{mT} = (0,T)\times\Omega_m$.

Диффузия вещества с концентрациями q_1, q_2 в сферической составляющей радиусом R_m с центром в точке $x \in \Omega_m$ пористой среды описывается уравнением

$$\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix} q_1(t,r,x) \\ q_2(t,r,x)\end{pmatrix} = \frac{1}{r^2}D_{\text{intra}}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\begin{pmatrix} q_1(t,r,x) \\ q_2(t,r,x)\end{pmatrix}\right), \tag{2}$$
$$r\in(0,R_m),\qquad 0<R_m\ll l,\qquad m=\overline{1,n+1}.$$

Начальные условия приняты однородными

$$U(t=0,x)=0, \quad q(t=0,r,x)=0, \quad x\in\Omega_m, \quad r\in(0,R_m), \quad m=\overline{1,n+1}. \tag{3}$$

Краевые условия для концентраций U_1, U_2:

$$D_{\text{inter}}\frac{\partial}{\partial x}U\bigg|_{x=0}=0, \qquad U|_{x=l}=\overline{U}(t), \qquad t\in(0,T), \tag{4}$$

где $U=\begin{pmatrix}U_1(t,x)\\U_2(t,x)\end{pmatrix}$, $\overline{U}=\begin{pmatrix}\overline{U}_1(t)\\\overline{U}_2(t)\end{pmatrix}$; D_{inter}, D_{intra} — матрицы коэффициентов диффузии по макро и микропорам, соответственно.

Краевые условия для концентраций $q=\begin{pmatrix}q_1(t,r,x)\\q_2(t,r,x)\end{pmatrix}$ в каждой точке $x\in\Omega_m$, $m=\overline{1,n+1}$:

$$\begin{gathered}
D_{\text{intra}}\frac{\partial}{\partial r}\begin{pmatrix}q_1(t,r,x)\\q_2(t,r,x)\end{pmatrix}\bigg|_{r=0}=0,\\
\begin{pmatrix}q_1(t,r,x)\\q_2(t,r,x)\end{pmatrix}\bigg|_{r=R_m}=\begin{pmatrix}k_1&0\\0&k_2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}U_1(t,x)\\U_2(t,x)\end{pmatrix}, \qquad t\in(0,T),
\end{gathered} \tag{5}$$

где $k_i=k_i(t)>0$, $i=1,2$.

В каждой точке $x=l_m$, $m=\overline{1,n}$, условия сопряжения имеют вид:

$$[U]|_{x=l_m}=0, \qquad t\in(0,T), \tag{6}$$

$$\left[D_{\text{inter}}\frac{\partial}{\partial x}U\right]\bigg|_{x=l_m}=0, \qquad t\in(0,T), \tag{7}$$

где $[\phi]|_{x=l_m}=\phi^+|_{l_m}-\phi^-|_{l_m}$, $\phi^\pm|_{l_m}=\phi(t,l_m\pm0)$.

2. Разномасштабная математическая модель диффузии вещества в слабой постановке. Пусть вектор-функция $U=\begin{pmatrix}U_1(t,x)\\U_2(t,x)\end{pmatrix}$ — составляющая классического решения дифференциальной задачи (1)–(7). Домножим обе части равенства (1) на произвольную функцию $v(x)\in H_{10}=\{v(x)=(v_1(x),v_2(x))\colon v|_{\Omega_i}\in W_2^1(\Omega_i),\ i=\overline{1,n+1},\ [v]|_{x=l_m}=0,\ m=\overline{1,n},\ v(l)=0\}$ и результат проинтегрируем по области Ω, где $\Omega=\bigcup\limits_{m=1}^{n+1}\Omega_m$. Имеем

$$\left(\frac{\partial U}{\partial t},v\right)+a_1(U,v)=l_1(q,v), \qquad t\in(0,T), \tag{8}$$

где

$$(\phi,\psi)=\int\limits_{\Omega}\sum_{i=1}^{2}\phi_i\psi_i dx, \qquad a_1(U,v)=\sum_{i,j=1}^{2}\int\limits_{\Omega}D_{\text{inter}_{ij}}\frac{\partial U_j}{\partial x}\frac{\partial v_i}{\partial x}dx,$$

$$l_1(q,v)=-\sum_{m=1}^{n+1}\frac{1}{R_m}\int\limits_{\Omega_m}D_{\text{intra}}\frac{\partial}{\partial r}q\bigg|_{r=R_m}vdx.$$

Обе части равенства (2) при каждом $x \in \Omega_m$, $m = \overline{1, n+1}$, домножим на произвольную функцию $w(r) \in H_{20} = \{v(r) = (v_1(r), v_2(r))\colon v(r) \in W_2^1(0, R_m), v(R_m) = 0\}$. Получим

$$\int\limits_0^{R_m} r^2 \frac{\partial q}{\partial t} w dr + a_2(q, w) = 0, \qquad x \in \Omega_m, \qquad m = \overline{1, n+1}, \qquad t \in (0, T). \tag{9}$$

На основании (3), (5) имеем

$$U|_{t=0} = 0, \qquad q|_{t=0} = 0, \qquad r \in (0, R_m), \qquad x \in \Omega_m, \qquad m = \overline{1, n+1}, \tag{10}$$

$$U|_{x=l} = U(t), \qquad q|_{r=R_m} = kU, \qquad x \in \Omega_m, \qquad m = \overline{1, n+1}, \qquad t \in (0, T), \tag{11}$$

где $k = \begin{pmatrix} k_1 & 0 \\ 0 & k_2 \end{pmatrix}$, $a_2(q, w) = \sum\limits_{i,j=1}^{2} \int\limits_0^{R_m} r^2 D_{\text{intra}ij} \frac{\partial q_j}{\partial r} \frac{\partial w_i}{\partial r} dr$.

Определение 1. Обобщенным решением дифференциальной задачи (1)–(7) называется вектор-функция $(U, q) \in H_1 \times H_2$, которая $\forall\, (v, w) \in H_{10} \times H_{20}$ удовлетворяет равенствам (8)–(11), где

$$H_1 = \Bigg\{ v = (v_1(t,x), v_2(t,x))\colon \sum_{m=1}^{n+1} \int\limits_0^T \int\limits_{\Omega_m} \sum_{i=1}^{2} \Bigg(v_i^2 + \bigg(\frac{\partial v_i}{\partial t}\bigg)^2 + \bigg(\frac{\partial v_i}{\partial x}\bigg)^2 \Bigg) dx dt < \infty,$$

$$[v]|_{x=l_m} = 0,\ m = \overline{1, n},\ v(t, l) = \overline{U}(t),\ t \in (0, T) \Bigg\},$$

$$H_2 = \Bigg\{ v(t, r, x) = (v_1(t, r, x), v_2(t, r, x))\colon$$

$$\sum_{m=1}^{n+1} \int\limits_0^T \int\limits_{\Omega_m} \sum_{i=1}^{2} \int\limits_0^{R_m} \Bigg(v_i^2 + \bigg(\frac{\partial v_i}{\partial t}\bigg)^2 + \bigg(\frac{\partial v_i}{\partial r}\bigg)^2 \Bigg) dr dx dt < \infty \Bigg\}.$$

3. Идентификация коэффициентов диффузии. Пусть в задаче (1)–(7) коэффициенты диффузии, т. е. элементы матриц D_{inter}, D_{intra}, являются неизвестными. При этом предполагаем, что в некоторых точках $\overline{d}_i \in \Omega$ известны концентрации U, q

$$U(t, \overline{d}_i) = f_i^1(t), \qquad q\bigg(t, \frac{R_i}{2}, \overline{d}_i\bigg) = f_i^2(t), \qquad i = \overline{1, n+1}, \qquad t \in (0, T), \tag{12}$$

где $f_i^1 = (f_{i1}^1, f_{i2}^1)$, $f_i^2 = (f_{i1}^2, f_{i2}^2)$.

Замечание 1. Количество точек $\overline{d}_i$ может быть произвольным, а наблюдения могут вестись за различными величинами U_l, q_l, $l = 1, 2$. Кроме того, как частный случай, могут быть неизвестными лишь некоторые составляющие матриц D_{inter}, D_{intra}, и неизвестными они могут быть лишь на отдельных областях Ω_m.

Тем самым получена задача (1)–(7), (12), состоящая в определении элементов матриц D_{inter}, D_{intra}, при которых решение $\overline{u} = (U, q)$ дифференциальной задачи (1)–(7) удовлетворяет равенствам (12).

Составим функционал-невязку

$$J(u)=\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n+1}\int_0^T\sum_{j=1}^{2}\left((U_j(u;t,\overline{d}_i)-f_{ij}^1)^2+\left(q_j\left(u;t,\frac{R_i}{2},\overline{d}_i\right)-f_{ij}^2\right)^2\right)dt, \tag{13}$$

где $u=(u^1,u^2)\in U=C_+^4([0,T])\times C_+^4([0,T])$, $C_+=\{v(t)\in C([0,T])\colon v>0\}$, $u^l=\{u_{ij}^l\}_{i,j=1}^2$, $u_{ij}^l=u_{ij}^l(t)$, $l=1,2$. Здесь u_{ij}^1, u_{ij}^2 — восстанавливаемые, наперед неизвестные элементы матриц D_{inter}, D_{intra}, соответственно.

Вместо задачи (1)–(7), (12) будем решать задачу (13), (8)–(11), состоящую в определении элемента $u\in U$, при котором выполняется условие

$$J(u)=\inf_{v\in U}J(v) \tag{14}$$

с ограничениями (8)–(11).

Приближение u_{n+1} решения $u\in U$ задачи (13), (8)–(11) будем находить с помощью итерационного процесса

$$u_{n+1}=u_n-\beta_n p_n, \qquad n=0,1,\ldots,n^*, \tag{15}$$

начиная с некоторого начального приближения $u_0\in U$, где направление спуска p_n и коэффициент β_n определяются выражениями [8]:

для метода минимальных ошибок

$$p_n=J'_{u_n}, \qquad \beta_n=\frac{\|e_n\|^2}{\|J'_{u_n}\|^2}; \tag{16}$$

для метода скорейшего спуска

$$p_n=J'_{u_n}, \qquad \beta_n=\frac{\|J'_{u_n}\|^2}{\|AJ'_{u_n}\|^2}; \tag{17}$$

для метода сопряженных градиентов

$$p_n=J'_{u_n}+\gamma_n p_{n-1}, \qquad \gamma_0=0, \qquad \gamma_n=\frac{\|J'_{u_n}\|^2}{\|J'_{u_{n-1}}\|^2}, \qquad \beta_n=\frac{(J'_{u_n},p_n)}{\|Ap_n\|^2}, \tag{18}$$

где J'_{u_n} — градиент функционала $J(u)$ в точке $u=u_n$, $e_n=Au_n-f$, $Au_n=$ $=\left(\{U_l(u_n;t,\overline{d}_i)\}_{l=1,i=1}^{2,n+1},\left\{q_l\left(u_n;t,\frac{R_i}{2},\overline{d}_i\right)\right\}_{l=1,i=1}^{2,n+1}\right)$, $f=(f^1,f^2)$, $f^l=\{f_{ij}^l(t)\}_{i=1,j=1}^{n+1,2}$, $l=1,2$.

На каждом шаге определения $(n+1)$-го приближения u_{n+1} решения $u\in U$ задачи на основе [7] сопряженная задача состоит в определении вектор-функции $\psi=(\psi^1,\psi^2)$, которая удовлетворяет системе равенств

$$-\frac{\partial\psi^1}{\partial t}=\frac{\partial}{\partial x}\left(u^{1T}\frac{\partial\psi^1}{\partial x}\right)+(U(u;t,\overline{d}_m)-f_m^1(t))\delta(x-\overline{d}_m), \quad (t,x)\in\Omega_{mT}, \quad m=\overline{1,n+1},$$

$$-\int_0^{R_m}\left(r^2\frac{\partial\psi^2}{\partial t},w\right)dr+\int_0^{R_m}r^2\left(u^{2T}\frac{\partial\psi^2}{\partial r},\frac{\partial w}{\partial r}\right)dr+\frac{1}{R_m}\left(u^2\frac{\partial w}{\partial r}\bigg|_{r=R_m},\psi^1\right)=$$

$$=\sum_{j=1}^{2}\left(q_j\left(u_n;t,\frac{R_m}{2},\overline{d}_m\right)-f_{mj}^2\right)w_j\left(\frac{R_m}{2},\overline{d}_m\right)\delta(x-\overline{d}_m),\quad m=\overline{1,n+1},\quad \forall\, w\in H_{20},$$

$$\psi^1|_{t=T}=0,\qquad \psi^2|_{t=T}=0,\qquad r\in(0,R_m),\qquad (t,x)\in\Omega_{mT},\tag{19}$$

$$\psi^1|_{x=l}=0,\qquad u^{1T}\frac{\partial\psi^1}{\partial x}\bigg|_{x=0}=0,$$

$$\psi^2|_{r=R_m}=k\psi^1,\qquad x\in\Omega_m,\qquad m=\overline{1,n+1},\qquad t\in(0,T),$$

где знак “T” обозначает транспонирование.

Следуя [7], на основании (19), с учетом [5, 6], пренебрегая членами второго порядка малости, получаем

$$\langle J'_{u_n},\Delta u_n\rangle=\lim_{\lambda\to0}\frac{J(u_n+\lambda\Delta u_n)-J(u_n)}{\lambda}\approx\sum_{m=1}^{n+1}\int\limits_0^T\int\limits_{\Omega_m}\left(\frac{\partial}{\partial x}\left(\Delta u^1\frac{\partial U}{\partial x}\right),\psi^1\right)dxdt-$$

$$-\sum_{m=1}^{n+1}\frac{1}{R_m}\int\limits_0^T\int\limits_{\Omega_m}\left(\Delta u^2\frac{\partial q}{\partial r}\bigg|_{r=R_m},\psi^1\right)dxdt+$$

$$+\sum_{m=1}^{n+1}\int\limits_0^T\int\limits_{\Omega_m}\int\limits_0^{R_m}\left(\Delta u^2\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial q}{\partial r}\right),\psi^2\right)drdxdt+\int\limits_0^T\left(\Delta u^1\frac{\partial U}{\partial x},\psi^1\right)\bigg|_{x=0}dt+$$

$$+\sum_{m=1}^{n+1}\int\limits_0^T\int\limits_{\Omega_m}\left(r^2\Delta u^2\frac{\partial q}{\partial r}\bigg|_{r=0},\psi^2\right)\bigg|_{r=0}dxdt.\tag{20}$$

Следовательно,

$$J'_{u_n}\approx\widetilde{\psi}_n,\tag{21}$$

где

$$\widetilde{\psi}_n=\{\widetilde{\psi}_n^m\}_{m=1}^{n+1},\qquad \widetilde{\psi}_n^m=\{\widetilde{\psi}_n^{m_l}\}_{l=1}^2,\qquad \widetilde{\psi}_n^{m_l}=\{\widetilde{\psi}_{n_{ij}}^{m_l}\}_{i,j=1}^2,$$

$$\widetilde{\psi}_{n_{11}}^{m_1}=\int\limits_{\Omega_m}\frac{\partial^2U_1}{\partial x^2}\psi_1^1dx+\frac{\partial U_1}{\partial x}\psi_1^1\bigg|_{x=0}\chi(2-m),$$

$$\widetilde{\psi}_{n_{12}}^{m_1}=\int\limits_{\Omega_m}\frac{\partial^2U_2}{\partial x^2}\psi_1^1dx+\frac{\partial U_2}{\partial x}\psi_1^1\bigg|_{x=0}\chi(2-m),$$

$$\widetilde{\psi}_{n_{21}}^{m_1}=\int\limits_{\Omega_m}\frac{\partial^2U_1}{\partial x^2}\psi_2^1dx+\frac{\partial U_1}{\partial x}\psi_2^1\bigg|_{x=0}\chi(2-m),$$

$$\widetilde{\psi}_{n_{22}}^{m_1}=\int\limits_{\Omega_m}\frac{\partial^2U_2}{\partial x^2}\psi_2^1dx+\frac{\partial U_2}{\partial x}\psi_2^1\bigg|_{x=0}\chi(2-m),\qquad \chi(2-m)=\begin{cases}0 & \text{при}\quad 2-m\neq1,\\ 1 & \text{при}\quad 2-m=1,\end{cases}$$

$$\widetilde{\psi}^{m_2}_{n_{11}} = \int\limits_{\Omega_m}\int\limits_0^{R_m}\left(\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial q_1}{\partial r}\right)\psi_1^2\right)dr dx - \frac{1}{R_m}\int\limits_{\Omega_m}\frac{\partial q_1}{\partial r}\bigg|_{r=R_m}\psi_1^1 dx + \int\limits_{\Omega_m} r^2\frac{\partial q_1}{\partial r}\bigg|_{r=0}\psi_1^2 dx, \qquad (22)$$

$$\widetilde{\psi}^{m_2}_{n_{12}} = \int\limits_{\Omega_m}\int\limits_0^{R_m}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial q_2}{\partial r}\right)\psi_1^2 dr dx - \frac{1}{R_m}\int\limits_{\Omega_m}\frac{\partial q_2}{\partial r}\bigg|_{r=R_m}\psi_1^1 dx + \int\limits_{\Omega_m} r^2\frac{\partial q_2}{\partial r}\bigg|_{r=0}\psi_1^2 dx,$$

$$\widetilde{\psi}^{m_2}_{n_{21}} = \int\limits_{\Omega_m}\int\limits_0^{R_m}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial q_1}{\partial r}\right)\psi_2^2 dr dx - \frac{1}{R_m}\int\limits_{\Omega_m}\frac{\partial q_1}{\partial r}\bigg|_{r=R_m}\psi_2^1 dx + \int\limits_{\Omega_m} r^2\frac{\partial q_1}{\partial r}\bigg|_{r=0}\psi_2^2|_{r=0} dx,$$

$$\widetilde{\psi}^{m_2}_{n_{22}} = \int\limits_{\Omega_m}\int\limits_0^{R_m}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial q_2}{\partial r}\right)\psi_2^2 dr dx - \frac{1}{R_m}\int\limits_{\Omega_m}\frac{\partial q_2}{\partial r}\bigg|_{r=R_m}\psi_2^1 dx + \int\limits_{\Omega_m} r^2\frac{\partial q_2}{\partial r}\bigg|_{r=0}\psi_2^2|_{r=0} dx,$$

$$\|J'_{u_n}\|^2 \approx \sum_{m=1}^{n+1}\sum_{l=1}^{2}\sum_{i,j=1}^{2}\int\limits_0^T (\widetilde{\psi}^{ml}_{n_{ij}})^2 dt.$$

Наличие приближения $\widetilde{\psi}_n$ градиента J'_{u_n} позволяет использовать градиентные методы (15) для решения задачи (8)–(11), (13).

Замечание 2. Следуя [7], на основании выражения (20) можем легко получить приближение градиента J'_{u_n} для случая параметрического представления параметров D_{inter}, D_{intra}, т. е. для случаев, когда восстанавливаемые элементы u^{ml}_{ij} ищутся в виде

$$u^{ml}_{ij} = \sum_{p=1}^{S_l}\alpha^{ml}_{ijp}\varphi^{ml}_p(t) > 0, \qquad (23)$$

где $\{\varphi^{ml}_p(t)\}_{p=1}^{S_l}$ — система линейно независимых функций.

Замечание 3. Следуя [7], приближение $\widetilde{\psi}_n$ градиента J'_{u_n} можем также получить на основании слабой задачи (8)–(11) определения приращения θ состояния $\overline{u}$, соответствующего приращению Δu восстанавливаемого параметра $u \in U$.

4. Идентификация коэффициентов диффузии двухкомпонентного вещества в наносоставляющих. Пусть состояние системы описывается дифференциальной задачей (1)–(7), в которой коэффициенты матрицы D_{intra}, отвечающие за сорбиционные свойства системы, являются неизвестными. При этом в некоторых точках $\overline{d}_i \in \Omega_i$, $i = \overline{1, n+1}$, известны распределения концентрации $U = U(t, \overline{d}_i)$ и концентрации $q = q\big(t, R_i/2, \overline{d}_i\big)$, заданные равенствами

$$U(t, \overline{d}_i) = f_i^1(t), \qquad (24)$$

$$q\left(t, \frac{R_i}{2}, \overline{d}_i\right) = f_i^2(t), \qquad i = \overline{1, n+1}, \qquad t \in (0, T). \qquad (25)$$

Тем самым получена задача (1)–(7), (24), (25), состоящая в нахождении функции $u = u(t) = \{u^m_{ij}(t)\}_{m=1;i,j=1}^{n+1;2} \in U = C_+^{4(n+1)}([0, T])$, при которой составляющие $U(t, x)$, $q(t, r, x)$ решения $\overline{u} = (U, q)$ задачи (1)–(7) удовлетворяют равенствам (24), (25).

Поскольку концентрации U, q задачи (1)–(7) связаны вторым соотношением системы (5), то ограничение (24) можно переписать так:

$$q(t, R_m, x) = K f_m^1(t), \qquad x \in \Omega_m, \qquad m = \overline{1, n+1}, \qquad t \in (0, T). \tag{26}$$

Следовательно, вместо задачи (1)–(7), (24), (25) можем рассматривать следующую задачу идентификации: необходимо определить функцию $u \in U$, при которой решения $q(t, r, x)$ задачи, заданной равенствами

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial}{\partial t} q = \frac{1}{r^2} u \frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} q\right), \qquad r \in (0, R_m), \qquad x = \overline{d}_m, \qquad m = \overline{1, n+1}, \\
&q(0, r, \overline{d}_m) = 0, \qquad r \in (0, R_m), \qquad m = \overline{1, n+1}, \\
&u \frac{\partial q}{\partial r}\bigg|_{r=0} = 0, \qquad x = \overline{d}_m, \qquad t \in (0, T), \qquad m = \overline{1, n+1},
\end{aligned} \tag{27}$$

и ограничениями (26), удовлетворяет равенствам (25).

Функционал-невязку определим так:

$$J(u) = \sum_{m=1}^{n+1} J_m(u^m), \tag{28}$$

где

$$J_m(u^m) = \frac{1}{2} \int_0^T \sum_{i=1}^{2} \left(q_i\left(u^m; t, \frac{R_m}{2}, \overline{d}_m\right) - f_i^2(t)\right)^2 dt. \tag{29}$$

Поскольку при каждом фиксированном $u \in U$ решение q задачи (27), (26) для различных $x = \overline{d}_m$ являются независимыми, то

$$\inf_{v \in U} J(v) = \sum_{m=1}^{n+1} \inf_{v \in U^m} J_m(v^m).$$

Следовательно, идентификацию параметров U можно провести последовательно, идентифицировав каждый $u^m \in U^m = C_+^4([0, T])$ задачи (26), (27), (29) для каждой области Ω_m отдельно.

Для каждого приближения u_n решения $u \in U = C_+^4([0, T])$ сопряженная задача имеет вид

$$\begin{aligned}
&-\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 u_n^T \frac{\partial}{\partial r} \psi\right) + \frac{1}{r^2}\left(q\left(u_n; t, \frac{R}{2}\right) - f^2(t)\right) \delta\left(r - \frac{R}{2}\right), \qquad t \in (0, T), \\
&u_n^T \frac{\partial \psi}{\partial r}\bigg|_{r=0}, \qquad \psi(t, R) = 0, \\
&\psi(T, r) = 0, \qquad r \in (0, R), \qquad R = R_m.
\end{aligned}$$

Следуя [7], для градиента J'_{u_n} функционала (29) имеем пиближение:

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

где

$$\widetilde{\psi}_n = \{\widetilde{\psi}_n^{ij}\}_{i,j=1}^2, \qquad \widetilde{\psi}_n^{11} = \int\limits_0^R \frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \frac{\partial q_1(u_n)}{\partial r}\right)\psi_1 dr + \lim_{r \to 0} r^2 \frac{\partial q_1(u_n)}{\partial r}\psi_1,$$

$$\widetilde{\psi}_n^{12} = \int\limits_0^R \frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \frac{\partial q_2(u_n)}{\partial r}\right)\psi_1 dr + \lim_{r \to 0} r^2 \frac{\partial q_2(u_n)}{\partial r}\psi_1,$$

$$\widetilde{\psi}_n^{21} = \int\limits_0^R \frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \frac{\partial q_1(u_n)}{\partial r}\right)\psi_2 dr + \lim_{r \to 0} r^2 \frac{\partial q_1(u_n)}{\partial r}\psi_2,$$

$$\widetilde{\psi}_n^{22} = \int\limits_0^R \frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \frac{\partial q_2(u_n)}{\partial r}\right)\psi_2 dr + \lim_{r \to 0} r^2 \frac{\partial q_2(u_n)}{\partial r}\psi_2, \quad \|J'_{u_n}\|^2 \approx \|\widetilde{\psi}_n\|^2 = \sum_{i,j=1}^2 \int\limits_0^T (\widetilde{\psi}_n^{ij})^2 dt.$$

Для задачи (29), (26), (27) справедливы замечания, аналогичные замечаниям 2, 3, высказанным по отношению к задаче идентификации (1)–(7), (13).

1. *Kärger J., Ruthven D.* Diffusion and adsorption in porous solids // Handbook of Porous Solids / Ed. by F. Shuth, K. W. Sing, J. Weitkamp. – Weinheim: Wiley-VCH, 2002. – P. 2089–2173.
2. *N'Gokoli-Kekele P. Springuel-Huet M.-A., Fraissard J.* An analytical study of molecular transport in a zeolite crystallite bed // Adsorption. – 2002. – 8 (3). – P. 35–44.
3. *Kärger J., Ruthven D.* Diffusion in zeolites and other microporous solids. – New York: Wiley, 1992. – 605 p.
4. *Петрик М. Р., Фрессард Ж., Михалик Д. М.* Моделирование и анализ концентрационных полей нелинейной компетитивной двухкомпонентной диффузии в среде нанопористих частиц // Проблемы управления и информатики. – 2009. – № 4. – С. 73–82.
5. *Дейнека В. С., Сергиенко И. В.* Оптимальное управление неоднородными распределенными системами. – Киев: Наук. думка, 2003. – 506 с.
6. *Sergienko I. V., Deineka V. S.* Optimal control of distributed systems with conjugation conditions. – New York: Kluwer, 2005. – 400 p.
7. *Сергиенко И. В., Дейнека В. С.* Системный анализ многокомпонентных распределенных систем. – Киев: Наук. думка, 2009. – 640 с.
8. *Алифанов О. М., Артюхин Е. А., Румянцев С. В.* Экстремальные методы решения некорректных задач. – Москва: Наука, 1988. – 288 с.

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

Поступило в редакцию 22.06.2010

Academician of the NAS of Ukraine **I. V. Sergienko,**
Academician of the NAS of Ukraine **V. S. Deineka**

Identification of parameters of problems of diffusion of two-component substances in nanoporous media by gradient methods

On the basis of the theory of optimal control over the states of multicomponent distributed systems, the expressions of the gradients of functionals-residuals are built for the identification of parameters of diffusion and sorption of two-component substances in nanoporous media.