

УДК: 517.954

Сопряженные сеточные параболические квазилинейные краевые задачи

И. А. Чернов^{1,a}, С. В. Маничева^{2,b}

¹Институт прикладных математических исследований КарНЦ РАН,
Россия, 185910, г. Петрозаводск, ул. Пушкинская, 11

²Карельская государственная педагогическая академия,
Россия, 185035, г. Петрозаводск, ул. Пушкинская, 17

E-mail: ^a IACHernov@yandex.ru, ^b elishahor@gmail.com

Получено 30 января 2012 г.

В работе построены сопряженные задачи для явной и неявной параболической квазилинейной сеточной пространственно-одномерной краевой задачи: коэффициенты задачи зависят от решения в текущий и предыдущие моменты времени. Зависимость от предыстории осуществляется через вектор состояния, эволюция которого описывается дифференциальным уравнением. К подобным задачам сводятся многие модели диффузионного массопереноса. Решения исходной и сопряженной краевых задач дают возможность получить точное значение градиента некоторого функционала в пространстве параметров, от которых также зависят коэффициенты задачи. Предложены алгоритмы решения задач, в том числе с использованием высокопроизводительных вычислительных систем.

Ключевые слова: сопряженная задача, оценка параметров, математическое моделирование, градиентные методы

Adjoint grid parabolic quazilinear boundary-value problems

I. A. Chernov¹, S. V. Manicheva²

¹Institute of Applied Math Research, 11 Pushkinskaya street, Petrozavodsk, 185910, Russia

²Karelian State Pedagogical Academy, 17 Pushkinskaya street, Petrozavodsk, 185035, Russia

Abstract. — In the paper we construct the adjoint problem for the explicit and implicit parabolic quazi-linear grid boundary-value problems with one spatial variable; the coefficients of the problems depend on the solution at the same time and earlier times. Dependence on the history of the solution is via the state vector; its evolution is described by the differential equation. Many models of diffusion mass transport are reduced to such boundary-value problems. Having solutions to the direct and adjoint problems, one can obtain the exact value of the gradient of a functional in the space of parameters the problem also depends on. We present solving algorithms, including the parallel one.

Keywords: adjoint problem, evaluation of parameters, mathematical modelling, gradient methods

Citation: *Computer Research and Modeling*, 2012, vol. 4, no. 2, pp. 275–291 (Russian).

Введение

Многие модели тепломассопереноса сводятся к квазилинейным параболическим краевым задачам с одной пространственной переменной с квазилинейными граничными условиями I–III рода. Под «квазилинейностью» мы подразумеваем зависимость коэффициентов уравнений и граничных условий от решения (но не его производных). Кроме того, в ряде случаев система обладает одним или несколькими «внутренними состояниями», меняющимися во времени в зависимости от решения и влияющими на него; такие внутренние состояния приводят, по существу, к зависимости коэффициентов задачи от значений решения в прошлом, что тоже относим к понятию «квазилинейность».

В частности, подобными задачами описывается процесс фазового перехода гидрид–металл после «выпрямления» свободной границы раздела фаз заменой пространственной переменной, известной как «выпрямление подвижного фронта». Достаточно общая задача этого вида рассмотрена в [Чернов, 2011]: предложена сеточная краевая задача (разностная схема) и доказана ее сходимости к слабому решению задачи. Изучение кинетики гидрирования металлических порошков важно для приложений в сфере энергетики [Sakintuna et al., 2007]. Представляют интерес обратные задачи определения тех или иных параметров, входящих в краевую задачу, на основе измерений. С физической точки зрения это методы оценки кинетических параметров различных материалов по экспериментальным данным; от них требуется устойчивость к погрешностям измерений и применимость к различным моделям и экспериментальным методам. Актуальность таких методов обусловлена трудностью выбора гидридообразующего материала, к которому предъявляется ряд жестких требований по скорости поглощения и выделения водорода, диапазону рабочих температур и давлений, массовому содержанию водорода и тому подобным характеристикам.

Нелинейные краевые задачи целесообразно решать приближенными методами даже при наличии точных методов [Каргашов, 2001] (на что трудно рассчитывать в общем случае), поскольку эти методы, как правило, узко специализированы, в связи с чем незначительные модификации модели могут полностью обесценить метод. С другой стороны, сеточные методы достаточно универсальны. Поэтому переходим к сеточной задаче и строим сопряженную задачу для нее. Наличие сопряженной задачи позволяет свести идентификацию параметров к итерационному решению системы алгебраических уравнений для параметров (на каждой итерации решаются исходная и сопряженная задачи) и выразить градиент невязки в пространстве параметров. Кроме того, решение сопряженной задачи выявляет наиболее критические процессы и параметры и позволяет оценить степень их влияния и, следовательно, допустимую погрешность оценки. Построение сопряженных операторов для нелинейных операторов математической физики — сложная задача, актуальность которой весьма значительна как в теории, так и в приложениях [Марчук, Агошков, Шутяев, 1993]. Определению диффузионных параметров с использованием сопряженного оператора, градиента в пространстве параметров и метода множителей Лагранжа для трехмерной классической диффузионной задачи (численный метод — метод конечных элементов) посвящена работа [Sluzalec, 2009].

Целью настоящей работы является построение сопряженной сеточной краевой задачи для квазилинейной параболической краевой задачи достаточно общего вида с одной пространственной переменной, хотя техника допускает обобщение на многомерный случай. Граничные условия — II–III рода, рассматриваются и условия I рода при дополнительных предположениях. Под квазилинейностью граничных условий подразумевается, что производная решения входит в них линейно. Таким образом, условия III рода нелинейно выражают производную на границе (поток) через решение в той же точке и, возможно, внутренние состояния системы; II рода — через внутренние состояния; I рода — задает нелинейное соотношение, которому должно соответствовать граничное значение.

Эволюция внутренних состояний определяется значениями этих состояний в тот же момент времени, значениями решения на границе в тот же момент времени, а также, возможно, потоками (производными решения на границе в тот же момент времени), входящими в соответствующее уравнение линейно. Для приложений тепломассопереноса это естественно: на внутреннее состояние системы влияют процессы на границе, то есть значения решения и потоков.

Функционал относится к интегральному типу, причем подынтегральное выражение в каждый момент времени зависит от внутренних состояний и решения в тот же момент времени. Функционал, коэффициенты уравнения в частных производных и правые части граничных условий и эволюционных уравнений для состояний зависят от вектора постоянных параметров.

Поиск минимума сеточного аналога функционала с уравнениями сеточной задачи в качестве ограничений методом множителей Лагранжа приводит к задаче безусловной минимизации функции Лагранжа, переменные в которой можно разделить на три группы: это решение исходной краевой задачи (в каждом узле сетки); множители Лагранжа (также в каждом узле сетки); собственно параметры краевой задачи. Требование обнуления производных по переменным второй группы приводит к соотношениям исходной краевой задачи; по переменным первой группы — к сопряженной сеточной краевой задаче; наконец, производные по параметрам образуют вектор-градиент в пространстве параметров, который может быть использован для методов спуска или, будучи приравненным к нулю, выражает необходимое условие минимума. При этом получаем точное значение градиента (для сеточной задачи), в отличие от вычисления его через конечные разности; кроме того, вычисление через конечные разности требует решения краевой задачи не менее чем k раз (k — число параметров), тогда как решение прямой и сопряженной задачи по одному разу дают точное значение градиента по явным формулам.

Постановка задачи

Рассматриваем следующую краевую задачу в прямоугольнике $\Pi = [0, L] \times [0, T]$ для параболического уравнения в частных производных:

$$\partial_t c = A \partial_x^2 c + B \partial_x c - \widehat{B} \partial_x c - Ec + F, \quad (1)$$

$$d_L \partial_x c(t, L) = -G(t, s(t), \rho(t), \zeta, c(t, L)), \quad (2)$$

$$d_0 \partial_x c(t, 0) = g(t, s(t), \rho(t), \zeta, c(t, 0)), \quad (3)$$

$$\dot{s}(t) = \Gamma(t, s(t), \rho(t), \zeta, c(t, 0), c(t, L)), \quad (4)$$

$$\dot{\rho}(t) = \Xi_0 \partial_x c(t, 0) + \Xi_L \partial_x c(t, L) + \Xi, \quad (5)$$

$$c(0, x) = \varphi(x) \in C^2([0, L]), \quad (6)$$

$$\int_0^T \Phi(t, s(t), \zeta, c(t, 0), c(t, L)) dt \rightarrow \min. \quad (7)$$

Коэффициент $A = A(t, x, s, \rho, \zeta) \geq \bar{A} > 0$ является функцией времени, точки, векторов состояния $s(t) \in R^{M_s}$ и $\rho(t) \in R^{M_\rho}$ и вектора параметров $\zeta \in R^k$, непрерывной, неотрицательной и ограниченной в $\Omega_x = [0, T] \times [0, L] \times R^M \times R^k$ ($M = M_s + M_\rho$) и обладающей там непрерывными и ограниченными частными производными. Коэффициенты B , \widehat{B} , E и F зависят еще и от крайних значений решения и производных части состояний: $B = B(t, x, \rho, \dot{\rho}, \zeta, c(t, 0), c(t, L))$, аналогично прочие. Они неотрицательны, ограничены и непрерывны в $\Omega_c = \Omega_x \times R^3$, обладают там непрерывными и ограниченными частными производными. Граничные условия (2), (3) — нелинейные; они III рода при $d_L = 1$ и $\partial_c G \neq 0$, II рода — при $d_L = 1$ и $\partial_c G = 0$ и I рода — при $d_L = 0$ и $\partial_c G \neq 0$ (аналогично второе условие). Константы d_0 , d_L равны нулю либо единице. Правые части G и g определены, непрерывны и ограничены в $[0, T] \times R^{M+k+1}$ вместе с частными производными. Непрерывные

правые части Γ и Ξ_0 , Ξ_L и Ξ уравнений (4) и (5), описывающих эволюцию векторов состояния s и ρ , ограничены в $\Omega = [0, T] \times R^{M+k+2}$ вместе со своими частными производными.

Внутренние состояния $s(t)$ определяются значениями решения на границе, в то время как $\rho(t)$ — еще и значениями производных на границе: в смысловом контексте задач тепломассопереноса это потоки. Формально, если $d_L = 1$, можно подставить (2) в (5) и, изменив обозначения, получить $\Xi_L \equiv 0$. Аналогично — с d_0 , поэтому в случае $d_L = d_0 = 1$ считаем $M_\rho = 0$ — все состояния определяются только значениями на границе. По той же причине предполагаем, что коэффициенты не зависят от производной s явно: эта зависимость может быть устранена подстановкой (4). В случае же, если одно или оба граничных условия относятся к I роду, Ξ_0 , Ξ_L или обе функции в общем случае не равны нулю тождественно. Предположим, что значения потоков на границах так или иначе заданы: либо $d_0 = 1$, либо $d = 0$, и тогда $M_\rho > 0$ и $\|\Xi_0\| \neq 0$ в области определения; аналогично — для d_L и Ξ_L . Отметим, что случай «чистого» условия I рода, когда сделанное предположение нарушается, тоже может быть с успехом рассмотрен, но эти задачи в настоящей работе не рассматриваем.

Подчеркнем, что векторы состояния $s(t)$, $\rho(t)$ зависят от решения и входят в коэффициенты уравнения в частных производных и граничные условия, осуществляя «зависимость от предыстории». Часть коэффициентов зависит от крайних значений решения непосредственно. Однако коэффициент от старшей производной зависит от решения гладким образом: полная производная по времени непрерывна по s в пространстве непрерывных функций C . Примерами компонент вектора состояния являются: температура в моделях дегидрирования; температура и давление в моделях гидрирования; свободная граница после замены пространственной переменной. Во всех случаях эволюция этих состояний определяется именно потоками на границах, которые могут быть исключены с использованием граничных условий III рода, как описано выше.

Теоремы о свойствах решения (менее общей) сеточной задачи и о сходимости разностной схемы доказаны в [Чернов, 2011].

Функционал (7) относится к интегральному типу; подразумевается, что в его определение входят те или иные измерения.

Введем в Π равномерную сетку с шагами τ и h , $0 \leq n \leq N$, $0 \leq i \leq I$. Узлы этой сетки (n, i) — это точки (t_n, x_i) . Пусть D_N — подмножество внутренних узлов ($0 < n < N$, $0 < i < I$). Обозначим $c(t_n, x_i) = c_n^i$, $s(t_n) = s_n = (s_n^1, \dots, s_n^M)$ и так далее. Введем разностные производные

$$\partial_\tau^- c_n^i = \frac{c_n^i - c_{n-1}^i}{\tau}, \quad \partial_\tau^+ c_n^i = \frac{c_{n+1}^i - c_n^i}{\tau}, \quad \partial_h^+ c_n^i = \frac{c_n^{i+1} - c_n^i}{h}, \quad \partial_h^- c_n^i = \frac{c_n^i - c_n^{i-1}}{h},$$

и пусть $\partial_h^2 c_n^i = \partial_h^+(\partial_h^- c_n^i)$. Коэффициенты уравнения (1) аппроксимируем смешанным образом: $B_n^i = B(t_n, x_i, s_n, \rho_n, \partial_\tau^- \rho_n, \zeta, c_{n-1}^0, c_{n-1}^I)$, и так же для остальных. Правые части (2), (3), (4), (5) и Φ — неявным образом, то есть на текущем слое: $G_n = G(t_n, s_n, \zeta, c_n^I)$, и так далее (отметим, что схема вычисления s_n и ρ_n получается явной). Заменяя производные разностными отношениями, получим задачу

$$\partial_\tau^- c_n^i - A_n^i \partial_h^2 c_n^i - B_n^i \partial_h^+ c_n^i + \widehat{B}_n^i \partial_h^- c_n^i + E_n^i c_n^i - F_n^i = 0, \quad (n, i) \in D_N, \quad (8)$$

$$d_L \partial_h^- c_n^I + G_n = 0, \quad g_n - d_0 \partial_h^+ c_n^0 = 0, \quad (9)$$

$$\partial_\tau^+ s_n^m - \Gamma_n^m = 0, \quad m = \overline{1 : M_s}, \quad (10)$$

$$\partial_\tau^+ \rho_n^m - (\Xi_0)_n^m \partial_h^+ c_n^0 - (\Xi_L)_n^m \partial_h^- c_n^I - \Xi_n^m = 0, \quad m = \overline{1 : M_\rho}, \quad (11)$$

$$c_n^i = \varphi(x_i), \quad (12)$$

$$\sum_{v=1}^N \Phi_v \tau = \sum_{v=1}^N \Phi(t_v, s_v, \zeta, c_v^0, c_v^I) \tau \rightarrow \min, \quad (13)$$

являющуюся неявной разностной схемой с погрешностью аппроксимации $O(h + \tau)$. Если же символ ∂_τ^- в (8) заменить на ∂_τ^+ , а коэффициенты (1) аппроксимировать на текущем слое, получим явную схему с той же погрешностью.

Метод множителей Лагранжа

Условия III рода

Рассмотрим сначала случай условий III рода, то есть $d_0 = d_L = 1$, $M_\rho = 0$. Умножим левые части (8)–(10) на множители Лагранжа $\lambda_n^i h \tau$ при $(n, i) \in D_N$, $P_n^I \lambda_n^I \tau$ и $P_n^0 \lambda_n^0 \tau$, $\mu_n \tau$ ($\mu_n \in R^M$) соответственно, просуммируем по $1 \leq n \leq N$ и $0 \leq i \leq I$ и прибавим к (13). Величины P_n^I и P_n^0 выберем позже. Множитель при (13) равен единице; известно, что множитель Лагранжа при минимизируемой функции равен единице либо нулю. Случай нулевого множителя будет рассмотрен и исключен далее.

Производные полученного выражения по λ_n^i , μ_n совпадают с левыми частями (8)–(10). Найдем производные по переменным c_n^i , s_n и ρ_n , приводящие к сопряженной краевой задаче. Сначала приравняем нулю производные по c_n^i при $0 < n < N$ и $2 \leq i \leq I - 2$. Эти переменные c_n^i входят только в (8) в узлах (n, i) , $(n + 1, i)$ и $(n, i \pm 1)$. Поделив оставшиеся слагаемые на $h\tau$, получаем сопряженное уравнение

$$-\partial_\tau^+ \lambda_n^i - \partial_h^2 (A_n^i \lambda_n^i) + \partial_h^- (B_n^i \lambda_n^i) - \partial_h^+ (\widehat{B}_n^i \lambda_n^i) + E_n^i \lambda_n^i = 0. \quad (14)$$

Это также сеточное параболическое и неявное уравнение, если рассматривать его в обратном времени (по убыванию n). Для явной схемы получаем аналогичное уравнение с заменой символа ∂_τ^+ на ∂_τ^- ; в обратном времени это уравнение также будет явной схемой.

Дифференцирование функции Лагранжа по c_n^{I-1} приводит к этому же уравнению (14) в узлах $(n, I - 1)$, если выбрать $P_n^I = A_n^I + h\widehat{B}_n^I$. В самом деле, c_n^{I-1} входит в (8) в узлах $(n, I - 1)$, $(n + 1, I - 1)$, $(n, I - 2)$, а также — в первое условие (9) один раз с множителем P_n^I , разделенным на два слагаемых. Аналогичным образом сопряженное уравнение справедливо в узлах вида $(n, 1)$, если выбрать $P_n^0 = A_n^0 + h\widehat{B}_n^0$. Узлы (N, i) рассматриваются аналогично, если положить формально $\lambda_{N+1}^i = 0$. Итак, мы получили сопряженное уравнение (14) для неизвестных λ_n^i при $(n, i) \in D_N$ и «начальное» условие для него. Производные по граничным значениям дадут граничные условия.

Дифференцирование по граничным значениям c_n^0 и c_n^I сложнее, так как эти значения нелинейно входят в коэффициенты уравнения, граничные условия и минимизируемую функцию. Для c_n^0 получаем уравнение

$$\begin{aligned} \partial_{c_n^0} \Phi_n - \sum_{i=1}^{I-1} \lambda_{n_1}^i (\partial_{c_n^0} B_{n_1}^i \partial_h^+ c_{n_1}^i - \partial_{c_n^0} \widehat{B}_{n_1}^i \partial_h^- c_{n_1}^i - \partial_{c_n^0} E_{n_1}^i c_{n_1}^i + \partial_{c_n^0} F_{n_1}^i) h - \\ - \mu_n \partial_{c_n^0} \Gamma_n - \partial_h^+ (A_n^0 \lambda_n^0) - \lambda_n^1 \widehat{B}_n^1 + \lambda_n^0 B_n^0 + \lambda_n^0 P_n^0 \partial_{c_n^0} g_n = 0. \end{aligned} \quad (15)$$

Здесь $n_1 = n + 1$. Слагаемое, содержащее $\partial_{c_n^0} P_n^0$, исчезло в силу второго граничного условия (9). Аналогично получаем второе граничное условие:

$$\begin{aligned} \partial_{c_n^I} \Phi_n - \sum_{i=1}^{I-1} \lambda_{n_1}^i (\partial_{c_n^I} B_{n_1}^i \partial_h^+ c_{n_1}^i - \partial_{c_n^I} \widehat{B}_{n_1}^i \partial_h^- c_{n_1}^i - \partial_{c_n^I} E_{n_1}^i c_{n_1}^i + \partial_{c_n^I} F_{n_1}^i) h - \\ - \mu_n \partial_{c_n^I} \Gamma_n + \partial_h^- (A_n^I \lambda_n^I) + \lambda_n^I \widehat{B}_n^I - \lambda_n^{I-1} B_n^{I-1} + \lambda_n^I P_n^I \partial_{c_n^I} G_n = 0. \end{aligned} \quad (16)$$

Найдем производные по вектору s_n ; он входит в коэффициенты уравнения и граничные условия на слое n , в функционал (13), а также в уравнение (10) на двух слоях:

$$\begin{aligned} \partial_{\tau}^{-} \mu_n = \partial_{s_n} \Phi_n - \sum_{i=1}^{I-1} \lambda_n^i (\partial_{s_n} A_n^i \partial_h^2 c_n^i + \partial_{s_n} B_n^i \partial_h^+ c_n^i - \partial_{s_n} \widehat{B}_n^i \partial_h^- c_n^i - \partial_{s_n} E_n^i c_n^i + \partial_{s_n} F_n^i) h - \\ - \partial_{s_n} \Gamma_n \mu_n + \lambda_n^0 P_n^0 \partial_{s_n} g_n + \lambda_n^I P_n^I \partial_{s_n} G_n. \end{aligned} \quad (17)$$

Здесь $\partial_{s_n} \Gamma_n$ — это матрица размера $M \times M$, а μ_n — M -мерный вектор-столбец. Условие $\mu_{N+1}^m = 0$ при $m = \overline{1 : M}$ получается из тех же соображений, что аналогичное условие для λ_{N+1}^i . Отметим, что уравнения (15)–(17) сохраняют свой вид для явной схемы, если положить $n_1 = n$. Дифференцирование функции Лагранжа по параметрам ζ громоздко, но принципиальных трудностей не представляет.

Условие I рода

Рассмотрим случай одного граничного условия I рода; прочие случаи рассматриваются аналогично. Пусть $d_L = 1$, $d_0 = 0$, и тогда, согласно предположению, $M_\rho > 0$ и $\|\Xi_0\| > 0$ во всей области определения. Кроме того, $\Xi_L \equiv 0$. Функцию Лагранжа строим так же, как и выше, но с коррекцией обозначений: умножим левые части (8) на множители Лагранжа $\lambda_n^i h \tau$ при $(n, i) \in D_N$, первого уравнения (9) — на $P_n^I \lambda_n^I \tau$, второго — на $\xi_n \tau$, уравнения (10) — на $\mu_n \tau$, а (11) — на $\widehat{P}_n^0 \lambda_n^0 \tau$, где вектор $P_n^0 \in R^{M\rho}$ при всех n . Его компоненты обозначим $(\widehat{P}_n^0)_m$. Просуммируем по $1 \leq n \leq N$ и $0 \leq i \leq I$ и прибавим к (13).

Дифференцирование функции Лагранжа по c_n^i при $0 < n < N$ и $2 \leq i \leq I - 1$ совершенно аналогично и приводит к (14). Производная по c_n^I , приравненная к нулю, приводит к уравнению

$$\begin{aligned} \partial_{c_n^I} \Phi_n - \sum_{i=1}^{I-1} \lambda_n^i (\partial_{c_n^I} B_{n_1}^i \partial_h^+ c_{n_1}^i - \partial_{c_n^I} \widehat{B}_{n_1}^i \partial_h^- c_{n_1}^i - \partial_{c_n^I} E_{n_1}^i c_{n_1}^i + \partial_{c_n^I} F_{n_1}^i) h - \\ - \lambda_n^0 \widehat{P}_n^0 \partial_{c_n^I} (\Xi_0)_n \partial_h^+ c_n^0 - \lambda_n^0 \widehat{P}_n^0 \partial_{c_n^I} \Xi_n - \mu_n \partial_{c_n^I} \Gamma_n - \partial_h^- (A_n^I \lambda_n^I) + \lambda_n^I \widehat{B}_n^I - \lambda_n^{I-1} B_n^{I-1} + \lambda_n^I P_n^I \partial_{c_n^I} G_n = 0. \end{aligned} \quad (18)$$

Дифференцирование по c_n^1 теперь тоже проводится сходным образом: оно входит в (8) в узлах $(n, 2)$, $(n, 1)$ и $(n + 1, 1)$, а также в (11). Уравнение (14) получается, если \widehat{P}_n^0 выбрать из условия $\widehat{P}_n^0 \cdot (\Xi_0)_n = A_n^0 + h B_n^0$ (в левой части — скалярное произведение). Это уравнение имеет (при $M_\rho > 1$) много решений; дополнительные соотношения получим ниже, дифференцируя по ρ_n^m .

Приравнивая производную по c_n^0 нулю, получаем уравнение

$$\begin{aligned} \partial_{c_n^0} \Phi_n - \sum_{i=1}^{I-1} \lambda_n^i (\partial_{c_n^0} B_{n_1}^i \partial_h^+ c_{n_1}^i - \partial_{c_n^0} \widehat{B}_{n_1}^i \partial_h^- c_{n_1}^i - \partial_{c_n^0} E_{n_1}^i c_{n_1}^i + \partial_{c_n^0} F_{n_1}^i) h - \\ - \lambda_n^0 \widehat{P}_n^0 \partial_{c_n^0} (\Xi_0)_n \partial_h^+ c_n^0 - \lambda_n^0 \widehat{P}_n^0 \partial_{c_n^0} \Xi_n - \mu_n \partial_{c_n^0} \Gamma_n - \partial_h^+ (A_n^0 \lambda_n^0) - \lambda_n^1 \widehat{B}_n^1 + \lambda_n^0 B_n^0 + \xi_n \partial_{c_n^0} (g_n) = 0. \end{aligned} \quad (19)$$

Эволюционные уравнения для μ_n аналогичны (17):

$$\begin{aligned} \partial_{\tau}^{-} \mu_n = \partial_{s_n} \Phi_n - \sum_{i=1}^{I-1} \lambda_n^i (\partial_{s_n} A_n^i \partial_h^2 c_n^i + \partial_{s_n} B_n^i \partial_h^+ c_n^i - \partial_{s_n} \widehat{B}_n^i \partial_h^- c_n^i - \partial_{s_n} E_n^i c_n^i + \partial_{s_n} F_n^i) h - \\ - \lambda_n^0 \widehat{P}_n^0 \partial_{\mu} (\Xi_0)_n \partial_h^+ c_n^0 - \lambda_n^0 \widehat{P}_n^0 \partial_{\mu} \Xi_n - \partial_{s_n} \Gamma_n \mu_n + \xi_n \partial_{s_n} g_n + \lambda_n^I P_n^I \partial_{s_n} G_n. \end{aligned} \quad (20)$$

Предположим для упрощения выкладок, что из коэффициентов (1) только \widehat{B} зависит от ρ . Уравнение для λ_n^0 имеет вид

$$\begin{aligned} \partial_{\tau}^{-} (\widehat{P}_n^0 \lambda_n^0) &= \partial_{\rho_n} \Phi_n - \sum_{i=1}^{I-1} \lambda_n^i (\partial_{\rho_n} A_n^i \partial_h^2 c_n^i + \partial_{\rho_n} B_n^i \partial_h^+ c_n^i - \partial_{\rho_n} \widehat{B}_n^i \partial_h^- c_n^i - \partial_{\rho_n} E_n^i c_n^i + \partial_{\rho_n} F_n^i) h - \\ &- \sum_{i=1}^{I-1} \partial_{\tau}^{-} (\lambda_n^i \partial_{\rho} (\widehat{B}_n^i)) h - \lambda_n^0 \widehat{P}_n^0 \partial_{\rho_n} (\Xi_0)_n \partial_h^+ c_n^0 - \lambda_n^0 \widehat{P}_n^0 \partial_{\rho_n} (\Xi_n) - \partial_{\rho_n} \Gamma_n \mu_n + \xi_n \partial_{\rho_n} g_n + \lambda_n^I P_n^I \partial_{\rho_n} G_n. \end{aligned} \quad (21)$$

Оно позволяет вычислить значения величин $\widehat{P}_{n-1}^0 \lambda_{n-1}^0$ по данным слоя с номером n . Совместно с уравнением для вектора \widehat{P}_{n-1}^0 получается полная система для определения как компонент этого вектора, так и скаляра λ_{n-1}^0 . Положительность коэффициентов (1) обеспечивает положительность величины $A_{n-1}^0 + h B_{n-1}^0$ и, следовательно, наличие единственного решения λ_{n-1}^0 этой системы; если $\lambda_{n-1}^0 \neq 0$, то \widehat{P}_{n-1}^0 также определяется однозначно. Достаточные условия разрешимости этой системы в общем случае весьма сложны и практически трудно применимы. Однако $\lambda_{n-1}^0 = 0$ означает, что множители Лагранжа всех ограничений (11) равны нулю и, следовательно эти ограничения пассивны (по крайней мере при данном n) — не влияют на оптимум функционала. Если наличие соответствующих внутренних состояний имеет физический смысл, эта ситуация невозможна. Если же она имеет место, это означает избыточность уравнений (11), и задача имеет «чистое» граничное условие I рода — такие задачи в этой работе не рассматриваются, хотя сопряженная задача может быть построена и для них. В частности, если другие уравнения краевой задачи, кроме (11), не зависят от ρ , $\lambda_n^0 = 0$ для всех n . Если от ρ зависит только функционал и соответствующее внутреннее состояние одно (то есть $M_{\rho} = 1$), то система имеет единственное решение; но если $M_{\rho} > 1$, решения может не быть (например, если векторы $\partial_{\rho_N} \Phi_N$ и $(\Xi_0)_N$ ортогональны).

Замечание о справедливости выкладок в случае явной схемы остается справедливым.

Решение неявной задачи

Уравнения (14)–(17) (или (14) с (18)–(21)) образуют линейную сеточную краевую задачу для уравнения (14). Как уже было отмечено, оно — сеточное параболическое в обратном времени, и представляет собой двухслойную неявную или явную разностную схему, в зависимости от выбора сеточной производной по времени в (8).

Полученная сопряженная задача аналогична сопряженной задаче, возникающей в теории управления применительно к обыкновенным дифференциальным уравнениям [Евтушенко, 1982]; при этом сопряженные переменные — множители Лагранжа — называются импульсами. Ситуация упрощается благодаря отсутствию зависящего от времени управления, в результате чего прямая задача решается независимо от сопряженной.

Изложим алгоритм решения неявной сопряженной сеточной задачи.

Условия III рода

Граничные условия (15) и (16) являются разностными уравнениями с двухточечным шаблоном. Дополнительные уравнения (17) для неизвестных μ_{n-1}^m также двухслойны и представляют собой явную схему: если λ_n^i и μ_n (как и решение исходной задачи c_n^i и s_n) известны, то μ_{n-1} определяется по явным формулам.

Следовательно, задача допускает эффективное послойное решение. Значения на начальном слое с номером $N + 1$ заданы: $\lambda_{N+1}^i = \mu_{N+1}^m = 0$ для всех i и m . Пусть величины λ_{n+1}^i и μ_n^m известны. Для решения линейной системы уравнений для неизвестных λ_n^i с трехдиагональной

матрицей применим обычный метод прогонки. Пусть $d_0 = 1$. Выразим из условия (15) (оно линейно относительно λ_n^i) неизвестную λ_n^0 через λ_n^1 . Получим формулу $\lambda_n^0 = \alpha_n^0 \lambda_n^1 + \beta_n^0$, где

$$\alpha_n^0 = \frac{A_n^1 + h\widehat{B}_n^1}{A_n^0 + hB_n^0 + hP_n^0 \partial_{c_n^0}(g_n)}.$$

Очевидно, что числитель и знаменатель строго больше нуля и $\alpha_n^0 = 1 + O(h)$. Если $d_0 = 0$, значение λ_n^0 определяется эволюционно по данным на слое с номером $n + 1$, и $\alpha_n^0 = 0$.

Подставляя формулу $\lambda_n^{i-1} = \alpha_n^{i-1} \lambda_n^i + \beta_n^{i-1}$ в уравнение (14) и выражая λ_n^i через λ_n^{i+1} , получим рекуррентные соотношения для α_n^i, β_n^i при $1 \leq i \leq I-1$ с начальными данными α_n^0, β_n^0 . Подставляя $\lambda_n^{I-1} = \alpha_n^{I-1} \lambda_n^I + \beta_n^{I-1}$ в условие (16), получаем линейное уравнение $\alpha_n^I \lambda_n^I = \beta_n^I$ относительно λ_n^I . Далее последовательно определяем все λ_n^i в порядке убывания i . Подставляя найденные λ_n^0 и λ_n^I в уравнения для μ_n^m , находим их по явным формулам.

Предложение 1. Матрица системы линейных алгебраических уравнений для λ_n^i при каждом n невырождена.

Доказательство. Для невырожденности необходима и достаточна разрешимость системы для любой правой части. Компоненты вектора правых частей системы влияют только на прогоночные коэффициенты β_n^i , но не на α_n^i . Поэтому, если все α_n^i рекуррентно определены, решение получается для любой правой части, и, следовательно, матрица невырождена. Единственной причиной, могущей воспрепятствовать определению α_n^i при каком-то i , является обнуление коэффициента при λ_n^i после приведения подобных членов. Убедимся, что этого не происходит.

Выпишем коэффициенты при неизвестных λ_n^{i-1} , λ_n^i и λ_n^{i+1} в i -ом уравнении (14) при заданном произвольном n :

$$\begin{aligned} a_n^{i-1} &= -\tau A_n^{i-1} - h\tau B_n^{i-1}, \\ a_n^i &= h^2 + 2\tau A_n^i + h\tau B_n^i + h\tau \widehat{B}_n^{i+1} + h^2 \tau E_n^i, \\ a_n^{i+1} &= -\tau A_n^{i+1} - h\tau \widehat{B}_n^{i+1}. \end{aligned}$$

Подстановка линейного соотношения в уравнение приводит к формуле

$$\alpha_n^i = \frac{-a_n^{i+1}}{a_n^i + \alpha_n^{i-1} a_n^{i-1}}.$$

Предложение 2. Пусть $\tau = o(h)$ и h достаточно мало; тогда $0 < \alpha_n^i < 1$ при $i = \overline{1: I-1}$.

Доказательство. Если $\alpha_n^{i-1} < 1$, то $\alpha_n^i > 0$, а если, дополнительно, $\tau = o(h)$ и шаг h достаточно мал, то этого достаточно для $\alpha_n^i < 1$. В самом деле, в этом случае знаменатель оценивается снизу величиной $-a_n^{i+1}$. Для индукции достаточно показать, что $0 < \alpha_n^1 < 1$. Поскольку $\alpha_n^0 = 1 + O(h)$, то знаменатель формулы для α_n^1 оценивается снизу величиной $-a_n^2$ (рассуждение аналогично). При $\alpha_n^0 = 0$ (случай условия I рода) неравенство $0 < \alpha_n^1 < 1$ получается сразу.

Предложение 3. Пусть $\tau = o(h)$ и $\epsilon_n^i = 1 - \alpha_n^i$; тогда $h = o(\epsilon_n^i)$ при $h \rightarrow 0$.

Доказательство. Это означает, что шаг h мал по сравнению с отклонением ϵ_n^i . В самом деле, рассмотрим

$$\frac{h}{\epsilon_n^i} = h \frac{a_n^i + \alpha_n^{i-1} a_n^{i-1}}{a_n^i + \alpha_n^{i-1} a_n^{i-1} + a_n^{i+1}} = h \frac{a_n^i + a_n^{i-1} - \epsilon_n^{i-1} a_n^{i-1}}{a_n^i + a_n^{i-1} + a_n^{i+1} - \epsilon_n^{i-1} a_n^{i-1}} = h \frac{h^2 + O(\tau) - \epsilon_n^{i-1} \bar{O}(\tau)}{h^2 + o(h\tau) - \epsilon_n^{i-1} \bar{O}(\tau)}.$$

Обозначение $\bar{O}(\tau)$ означает величину, являющуюся $O(\tau)$, но не $o(\tau)$. В случае, если $\tau = o(h^2)$, имеем с учетом ограниченности ϵ_n^{i-1}

$$\frac{h}{\epsilon_n^i} = h \frac{h^2 + o(h^2)}{h^2 + o(h^2)} \rightarrow 0.$$

Если же $h^2 = O(\tau)$ и $h = o(\epsilon_n^{i-1})$, то

$$\frac{h}{\epsilon_n^i} = h \frac{O(\tau) - \bar{O}(\epsilon_n^{i-1})}{O(\tau) - \bar{O}(\epsilon_n^{i-1})} = h \frac{\bar{O}(\epsilon_n^{i-1})}{\bar{O}(\epsilon_n^{i-1})} \rightarrow 0.$$

Осталось проверить утверждение для ϵ_n^1 :

$$\frac{h}{\epsilon_n^1} = h \frac{h^2 + O(\tau) - O(h)\bar{O}(\tau)}{h^2 + o(h\tau) - O(h)\bar{O}(\tau)} = \frac{O(\tau)}{h + o(h)}.$$

Это выражение стремится к нулю при $h \rightarrow 0$, так как $\tau = o(h)$.

Последнее уравнение системы содержит две неизвестные, λ_n^I и λ_n^{I-1} , с коэффициентами $A_n^I/h + \widehat{B}_n^I + P_n^I \partial_{c_n^I}(G_n)$ и $-(A_n^{I-1}/h + B_n^{I-1})$. Подстановка прогоночной связи дает уравнение

$$\alpha_n^I = A_n^I/h + \widehat{B}_n^I + P_n^I \partial_{c_n^I}(G_n) - \alpha_n^{I-1}(A_n^{I-1}/h + B_n^{I-1}) = K - \frac{\epsilon_n^{I-1}}{h} A_n^{I-1},$$

где K — совокупность всех ограниченных слагаемых; в силу доказанного утверждения получаем, что при достаточно малых h величина α_n^I не может равняться нулю, что завершает доказательство утверждения 1.

Итак, матрица системы невырождена, и, следовательно, при любой правой части система имеет единственное решение. Теперь совершенно ясно, почему множитель Лагранжа при минимизируемой функции не может быть равен нулю. В самом деле, в этом случае система для каждого слоя имеет нулевое решение, которое единственно; поэтому все $\lambda_n^i = \mu_n^m = 0$ при всех n , i и m , в то время как хотя бы один из множителей Лагранжа отличен от нуля.

Аналогично получаем тождественно нулевое решение сопряженной задачи, если $\Phi \equiv 0$, что соответствует подстановке решения прямой задачи в качестве измерений в функционал. Вполне ожидаемо получается исходное решение прямой задачи и равный нулю градиент.

Алгоритм решения сопряженной задачи в случае условий III рода таков. Пусть значения λ_{n+1}^i и μ_{n+1} известны. По формулам (17) определяем компоненты вектора μ_n . Вычисляем начальные прогоночные коэффициенты α_n^0 и β_n^0 . Определяем прогоночные коэффициенты α_n^i , β_n^i с помощью рекуррентного соотношения в порядке возрастания i от $i = 1$ до $i = I - 1$. Подставляя формулу $\lambda_n^{I-1} = \alpha_n^{I-1} \lambda_n^I + \beta_n^{I-1}$ в граничное условие (16), вычисляем λ_n^I . Последовательно определяем λ_n^i в порядке убывания i от $i = I - 1$ до $i = 0$ с помощью прогоночного соотношения.

Условие I рода

В случае условия I рода алгоритм незначительно меняется. Основное различие — нарушение ленточной структуры матрицы линейных уравнений для λ_n^i , связанное с уравнением (21), содержащие (в общем случае) все λ_n^i (коэффициенты при них содержат производные параметров по ρ). Однако матрица имеет трехдиагональную подматрицу, что позволяет модифицировать метод прогонки применительно к этому случаю. Пусть λ_{n+1}^i , μ_{n+1} и ξ_{n+1} известны, как и решение прямой задачи c_ν^j , s_ν и ρ_ν при всех ν и j . Явная схема (20) позволяет получить значения μ_n . Линейное граничное условие (18) содержит только две неизвестные: λ_n^I и λ_n^{I-1} . Выразим первую

из них через вторую: $\lambda_n^l = \bar{\alpha}_n^l \lambda_n^{l-1} + \bar{\beta}_n^l I$. Подставляя прогоночную связь $\lambda_n^i = \bar{\alpha}_n^i \lambda_n^{i-1} + \bar{\beta}_n^i$ в (14), получаем рекуррентно все $\bar{\alpha}_n^i$ и $\bar{\beta}_n^i$ при данном n . Запишем линейное уравнение (21) в виде

$$p_0^0 \lambda_n^0 + \sum_{i=1}^{J_0} p_i^0 \lambda_n^i = R_0, \quad J_0 = I, \quad p_0^0 = \bar{P}_n^0. \quad (22)$$

Пользуясь прогоночной связью, исключаем неизвестные λ_n^i , начиная с λ_n^{I-1} , в порядке убывания i . При переходе от шага K к шагу $K+1$ коэффициенты меняются по формулам ($0 \leq i < I-K$)

$$J_K = J_{K-1} - 1, \quad p_i^K = p_i^{K-1}, \quad p_{I-K}^K = p_{I-K}^{K-1} + p_{I-K+1}^{K-1} \cdot \bar{\alpha}_n^{I-K+1}, \quad R_K = R_{K-1} - p_{I-K+1}^{K-1} \cdot \bar{\beta}_n^{I-K+1}. \quad (23)$$

На шаге с номером $K=I$ получим векторное уравнение $p_0^I \lambda_n^0 = R_I$, где неизвестный вектор p_0^I связан с вектором \bar{P}_n^0 формулой $p_0^I = \bar{P}_n^0 + p_1^{I-1} \cdot \bar{\alpha}_n^1$. Умножая последнее уравнение скалярно на $(\Xi_0)_n$ с учетом соотношения $\bar{P}_n^0 \cdot (\Xi_0)_n = A_n^0 + hB_n^0$, получим $(A_n^0 + hB_n^0 + p_1^{I-1} \cdot (\Xi_0)_n \cdot \bar{\alpha}_n^1) \lambda_n^0 = R_I$, откуда следует λ_n^0 ; зная это значение, получаем выражения для компонент вектора p_0^I и, следовательно, вектора \bar{P}_n^0 .

Начальные значения, как и ранее, $\lambda_{N+1}^i = \mu_{N+1}^m = \xi_{N+1} = 0$ для всех i и m . Хотя уравнение для ξ_n не эволюционное, при $n=N+1$ оно неприменимо.

Алгоритм таков. Пусть значения λ_{n+1}^i и μ_{n+1}^m известны. По формулам (20) определяем компоненты вектора μ_n . Вычисляем начальные прогоночные коэффициенты $\bar{\alpha}_n^i$ и $\bar{\beta}_n^i$ из уравнения (18) и рекуррентно все $\bar{\alpha}_n^i$ и $\bar{\beta}_n^i$ в порядке убывания $i > 0$ из (14). Последовательно исключаем неизвестные в уравнениях (21) и определяем \bar{P}_n^0 и λ_n^0 . Последовательно вычисляем λ_n^i в порядке возрастания i из прогоночной связи. Подставляем найденные величины в (19) и определяем ξ_n .

Параллельный алгоритм для явной схемы

Как известно [Бахвалов, Жидков, Кобельков, 2000], неявные разностные схемы, безусловно, устойчивы, и в этом их важное преимущество перед явными схемами, накладывающими условие на шаг по времени. Однако алгоритмы расчета явных схем допускают эффективное распараллеливание, поэтому для расчетов на высокопроизводительных ЭВМ они могут быть предпочтительнее.

Рассмотрим параллельный алгоритм решения прямой и сопряженной сеточных краевых задач в явной постановке. Решение прямой задачи — это значения c_n^i и s_n^m при $n = \bar{0} : \bar{N}$, $i = \bar{0} : \bar{I}$, $m = \bar{1} : \bar{M}$, а сопряженной — значения λ_n^i и μ_n^m , хранимые в массивах той же конфигурации; поскольку задачи решаются последовательно, эти массивы можно использовать повторно.

Пусть число процессов равно $I+M+2$. Тогда c_n^i и λ_n^i при каждом i и s_n^m и μ_n^m при каждом m рассчитываются отдельными процессами с номерами от 1 до $I+1$ и от $I+2$ до $I+M+1$, и еще один процесс (с номером ноль) вычисляет градиент и выполняет вспомогательные действия.

Рассмотрим решение прямой задачи. При $n=0$ значения c_n^i и s_n^m известны из начальных условий. Предположим, что при некотором n значения c_n^i и s_n^m уже определены и всем процессам они известны (точнее, известны необходимые для расчета значения). Каждый процесс от 2 до I вычисляет по явным формулам (8) (в явной формулировке) значения c_{n+1}^i и рассылает их «соседям», то есть процессам с номерами, отличающимися на единицу, а также группе процессов $I+2$ до $I+M+1$ и процессу 0. Процессы от $I+2$ до $I+M+1$ вычисляют по явным формулам (10) при $n+1$ значения s_{n+1}^m и рассылает их всем процессам. Процессы 1 и $I+1$, получив новые значения c_{n+1}^i и s_{n+1}^m , вычисляют c_0^{n+1} и c_I^{n+1} , решая уравнения (9) при $n+1$, и рассылает найденные значения всем процессам.

Отметим, что нелинейные уравнения, решаемые процессами 1 и $I+1$, эффективно решаются методом дихотомии, если функции $G(t, s, \rho, \zeta, c)$ и $g(t, s, \rho, \zeta, c)$ монотонны по c . Далее рассчитывается слой $n+1$. При этом процесс 0 может вычислять контрольные инварианты (например, выполнение законов сохранения) и сохранять вывод программы.

Когда получены значения c_N^i и s_N^m , процессы переходят к решению сопряженной задачи. Схема коммуникации меняется: уравнения (15)–(17) на слое n содержат λ_{n+1}^i при всех i и поэтому значения λ_n^i должны быть известны всем процессам. Значения $\lambda_{N+1}^i = \mu_{N+1}^m = 0$ заданы. Пусть λ_n^i и μ_n^m уже известны. Процессы от 2 до I вычисляют по формулам (14) (в явной формулировке) значения λ_{n-1}^i . При этом значения c_{n-1}^i используются в вычислениях и затем замещаются вычисленными λ_{n-1}^i . Процессы от $I+2$ до $I+M+1$ вычисляют по явным формулам (17) μ_{n-1}^m и замещают ими более ненужные s_{n-1}^m . Процессы 1 и $I+1$, получив новые значения λ_{n-1}^i и μ_{n-1}^m , определяют λ_{n-1}^0 и λ_{n-1}^I из (15) и (16) при $n-1$ соответственно. При этом процесс 0, получая вычисляемые λ_n^i и μ_n^m и располагая найденным ранее решением прямой задачи c_n^i, s_n^m , вычисляет градиент функционала F , аккумулируя слагаемые в ходе уменьшения n по мере поступления λ_n^i . При этом поступающие λ_n^i и μ_n^m используются при расчете градиента и затем могут быть перезаписаны. Когда получены значения λ_1^i и μ_1^m , задача решена. Модификация алгоритма для задачи с условиями I рода очевидна.

Таким образом, возможность ускорения ограничена только числом процессоров в системе при достаточно скромных запросах к памяти и объему пересылаемых данных.

Решение исходной задачи

Кратко опишем метод решения исходной задачи (8)–(12) в неявной постановке. Подробное изложение и доказательства даны в [Чернов, 2011]. Эта задача нелинейна, но также допускает декомпозицию по слоям, то есть определение c_n^i и s_n^m при каждом n последовательно в порядке возрастания n . При этом s_n^m определяются по явным формулам (10), поскольку Γ_{n-1} зависит только от слоя с номером $n-1$. Система уравнений при фиксированном n также нелинейна, но содержит много линейных уравнений (8), так как коэффициенты A_n^i и прочие тоже зависят только от слоя с номером $n-1$. Для исключения линейных уравнений и части неизвестных применим вариант метода прогонки:

$$c_n^i = \hat{\alpha}_n^i c_n^{i+1} + \hat{\beta}_n^i + \hat{\gamma}_n^i c_n^0.$$

Начальные значения для рекуррентного соотношения очевидны: $\hat{\alpha}_n^0 = \hat{\beta}_n^0 = 0, \hat{\gamma}_n^0 = 1$. Подстановка в (8) приводит к рекуррентному соотношению, причем все $\hat{\alpha}_n^i \in (0, 1)$ при $i > 0$. Подстановка прогоночного соотношения в нелинейное граничное условие дает уравнение для двух неизвестных c_n^0 и c_n^I . Второе уравнение получим аналогичным образом, рассмотрев прогонку

$$c_n^i = \check{\alpha}_n^i c_n^{i-1} + \check{\beta}_n^i + \check{\gamma}_n^i c_n^I.$$

Полученная система двух нелинейных уравнений с двумя неизвестными имеет решение, если правые части граничных условий монотонны по c .

Отметим, что для решения этой системы необходимы только $\hat{\alpha}_n^{I-1}, \hat{\beta}_n^{I-1}, \hat{\gamma}_n^{I-1}$ и $\check{\alpha}_n^1, \check{\beta}_n^1, \check{\gamma}_n^1$. Для определения всех c_n^i требуется только один из наборов коэффициентов; поэтому в вычислительном алгоритме целесообразно использовать одну область памяти для двух наборов прогоночных коэффициентов (с сохранением крайних значений). Кроме того, две «встречные» прогонки могут выполняться параллельно.

Пример модели

В качестве примера рассмотрим модель гидрирования порошка металла в одночастичном приближении [Chernov et al., 2010]. Использование порошкообразного материала связано с высокой удельной поверхностью и существенным снижением плотности материала при гидрировании, влекущем растрескивание образца и формирование мелкого порошка при многократном гидрировании/дегидрировании.

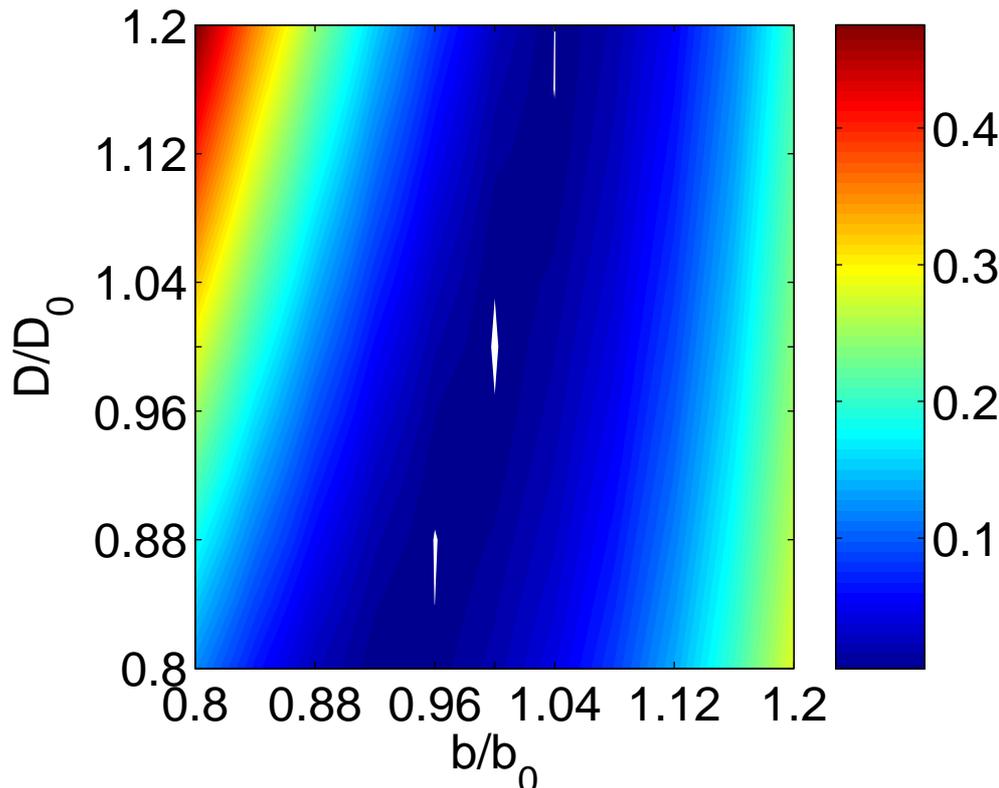


Рис. 1. Линии уровня функционала при фиксированном $J_{\text{ads}} = J_0$

Мы рассматриваем диффузионную модель гидрирования одной частицы порошка с изменением сорбционного потока на поверхности частицы. Частица имеет симметричную форму, которая позволяет ограничиться одной пространственной переменной. Модель представляет собой нелинейную параболическую краевую задачу со свободной границей, которая заменой переменной сводится к задаче в неподвижных границах, но с внутренним состоянием, в роли которого выступает положение свободной границы.

Предполагаемая симметрия частицы (шар, бесконечный цилиндр и плоская бесконечная пластина) позволяет ограничиться одной пространственной переменной в соответствующей координатной системе. Гидрирование считаем изотермическим; постоянство температуры в пространстве обусловлено малыми размерами частицы и высокой теплопроводностью материала, а во времени — гидрированием при условиях, близких к равновесным [Bloch, 2003]. Модель легко может быть обобщена на случай экзотермического гидрирования и переменного давления, в которых пространственно-постоянная температура частицы и давление газообразного водорода меняются в ходе гидрирования и влияют на его кинетику, то есть являются внутренними

состояниями системы [Чернов, 2010]. При необходимости учета пространственного градиента температуры можно предположить равновесное распределение последней в каждый момент времени [Заика, Родченкова, 2008], в результате значения температуры на границах играют роль внутренних состояний системы.

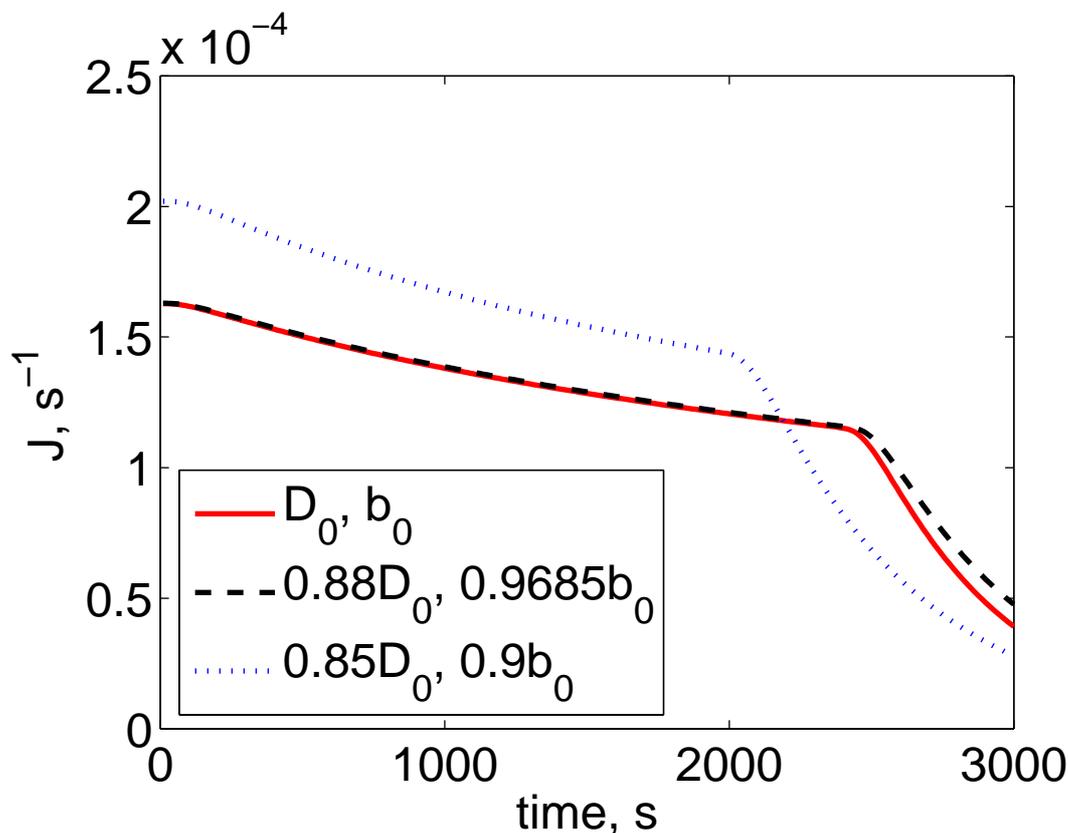


Рис. 2. Плотность потока сорбции при трех наборах параметров

Предполагаем сценарий «сжимающегося ядра» — формирование корки гидрида на поверхности частицы и ее дальнейшее утолщение (при этом поверхность металлической фазы исчезает через некоторое время в отличие от сценария «зарождения и роста зародышей», при котором поверхность фазы металла остается до ее полного исчезновения). Рассматриваем только этап утолщения корки, принимая за ноль момент ее формирования. Считаем, что водород может растворяться в фазе гидрида, поэтому концентрация там может быть выше минимального стехиометрического уровня, принимаемого за единицу. Концентрация на границе раздела фаз — стехиометрическая. Концентрация в фазе металла мала по сравнению с единичной, и ею пренебрегаем. Частица состоит из ядра фазы металла и корки фазы гидрида. Размер (радиус в случае шара или цилиндра) частицы L примем за единицу. Размер металлического ядра обозначим $\rho(t)$, $\rho(0) = \rho_0 < 1$. Плотность потока адсорбции на поверхности зависит от давления; в рассматриваемом случае это константа J_{ads} ; плотность потока десорбции пропорциональна квадрату приповерхностной концентрации, $J_{des} = bc^2$, что связано с формированием молекул H_2 и приводит к нелинейным граничным условиям. Пусть t^* — момент времени, когда гидрирование завершено, то есть $\rho(t^*) = 0$, а \widehat{t} — время эксперимента, то есть $\widehat{t} - t^*$ — это время насыщения гидридной фазы. Математическая модель представляет собой краевую задачу с нелинейным граничным условием

и свободной границей и имеет вид [Chernov et al., 2010]

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial r^2} + \frac{D\sigma}{r} \cdot \frac{\partial c}{\partial r}, \quad r \in (\rho(t), 1), \quad t \in (0, \widehat{t}), \quad (24)$$

$$D \frac{\partial c}{\partial r} = J_{\text{ads}} - bc^2(t, 1), \quad t \in (0, \widehat{t}), \quad (25)$$

$$c(t, \rho(t)) = 1, \quad t \in (0, t^*), \quad (26)$$

$$\frac{d\rho}{dt} = -D \frac{\partial c}{\partial r}(t, \rho(t)), \quad t \in (t^*, \widehat{t}), \quad (27)$$

$$\rho(t) \equiv 0, \quad t \in (t^*, \widehat{t}), \quad (28)$$

$$c(0, r) = \varphi(r), \quad r \in [\rho_0, 1]. \quad (29)$$

Здесь (24) — уравнение диффузии в сферических ($\sigma = 2$), цилиндрических ($\sigma = 1$) или декартовых ($\sigma = 0$) координатах в прямоугольной области. Нелинейное граничное условие третьего рода (25) — уравнение баланса потоков на поверхности. Условие первого рода (26) означает, что концентрация на границе раздела фаз стехиометрическая. Условие (27) выражает сохранение вещества при гидрировании и условие симметрии после его завершения (с учетом (28)); это условие типа Стефана на свободной границе раздела фаз и граничное условие второго рода, заменяющее (26) после окончания гидрирования. Начальное распределение описывается (29).

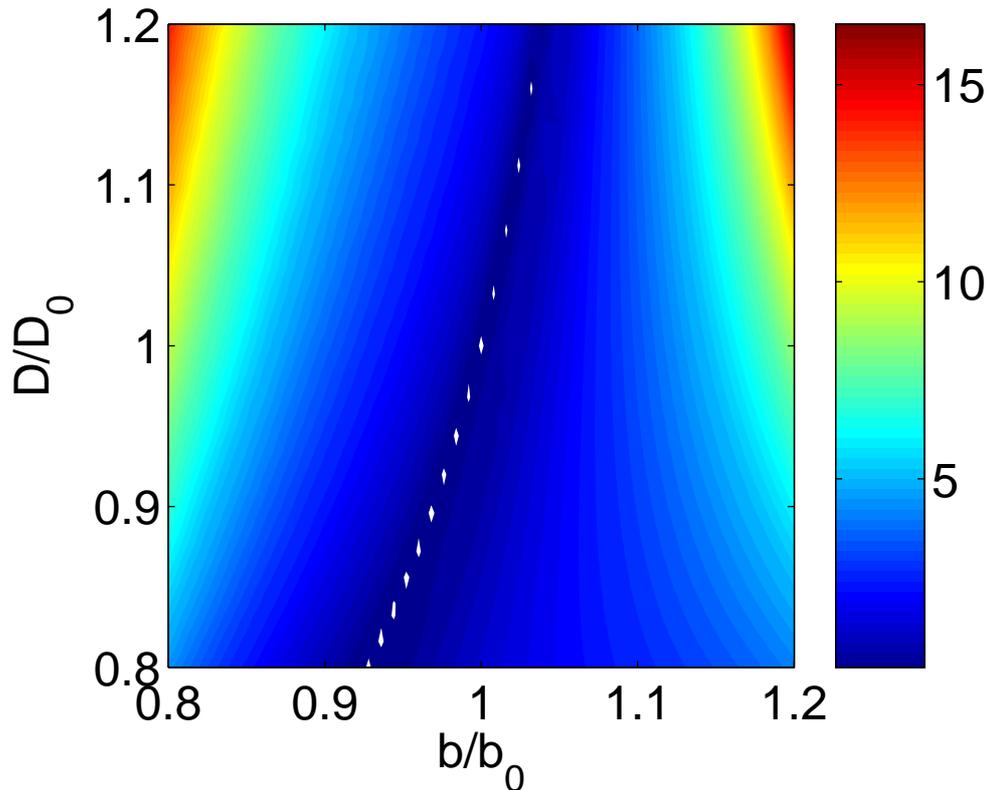


Рис. 3. Линии уровня нормы градиента при фиксированном $J_{\text{ads}} = J_0$

С целью устранить свободную границу, отобразим область на прямоугольник заменой пространственной переменной [Карташов, 2001; Заика, Родченкова, 2008]: $u(t, x) = c(t, r)$,

$r = \rho(t) + x(1 - \rho(t))$. Новая переменная $x \in [0, 1]$, однако $\rho(t)$ становится внутренним состоянием краевой задачи в прямоугольнике. Измерению доступен поток сорбции на поверхности частицы, и можно определить его плотность $\widehat{J}(t)$; в качестве минимизируемого функционала примем среднеквадратичное отклонение плотности модельного потока (правая часть (25)) от наблюдаемой. В обозначениях, введенных выше, коэффициенты задачи на интервале времени $[0, t^*]$ имеют вид

$$A = \frac{D}{(1-\rho)^2}, \quad B = \frac{D\sigma}{1-\rho}, \quad \widehat{B} = -\frac{1-x}{1-\rho} \cdot \dot{\rho}, \quad E = F = 0, \quad k = 3,$$

$$G = (J_{\text{ads}} - bu^2(t, 1)) \frac{1-\rho}{D}, \quad g = u(t, 0) - 1, \quad d_L = 1, \quad d_0 = 0, \quad M_s = 0, \quad M_p = 1,$$

$$\Xi_0 = -\frac{D}{1-\rho}, \quad \Xi_L = 0, \quad \Xi = 0, \quad \Phi = (J_{\text{ads}} - bu^2(t, 1) - \widehat{J}(t))^2.$$

Это задача с условием I рода. Неизвестное время t^* определяется из условия $\rho(t^*) = 0$ (для сеточной задачи n^* , отвечающее $t_{n^*} \approx t^*$, определяется из условия $\rho_{n^*} \leq 0$). На интервале $[t^*, \widehat{t}]$ задача меняет форму: граничные условия II и III рода, а внутренние состояния, по существу, отсутствуют. В обозначениях выше

$$A = D, \quad B = D\sigma, \quad \widehat{B} = E = F = 0, \quad k = 3,$$

$$G = \frac{J_{\text{ads}} - bu^2(t, 1)}{D}, \quad g = 0, \quad d_L = d_0 = 1, \quad M_s = M_p = 0,$$

$$\Phi = (J_{\text{ads}} - bu^2(t, 1) - \widehat{J}(t))^2.$$

Вектор параметров для обеих задач $\zeta \in R^3$ содержит параметры D (коэффициент диффузии водорода в фазе гидрида), J_{ads} — плотность потока адсорбции и b — константа десорбции. Отметим, что если температура образца меняется во времени, то каждый из этих параметров является функцией температуры (обычно применяется закон Аррениуса), и эта зависимость определяется другими параметрами.

Сеточные аналоги этих двух задач решаются последовательно: сначала первая, пока внутреннее состояние ρ_n сеточной задачи, изначально положительное, не станет меньше либо равно нулю; затем вторая вплоть до конца заданного временного интервала. Решение первой задачи на последнем слое по времени служит начальным условием для второй задачи. Сопряженные задачи решаются в обратном порядке, конечное решение второй служит начальными данными для первой. Такие «переключения» типичны для моделей тепломассопереноса с учетом фазовых переходов, и объединить их в одной краевой задаче бывает удобно.

К этой задаче был применен метод градиентного спуска для определения параметров. Градиент функционала в пространстве параметров вычислялся с использованием предложенной выше техники. В качестве измерений выступали модельные данные, то есть модельные кривые, полученные решением прямой задачи. Значения параметров $D_0 = 8,48 \cdot 10^{-4}$, $J_0 = 1,4$, $b_0 = 1,09$ (размерность всех параметров — с^{-1}). Модельные кривые были поданы на вход подпрограмме градиентной оптимизации с измененным набором кинетических параметров в качестве начального приближения. В ряде случаев исходные параметры восстанавливались, в других обнаруживался другой набор, дающий близкий результат. На рис. 1 приведены линии уровня функционала при фиксированном $J_{\text{ads}} = J_0$. Хорошо видны три минимума, один из которых — истинный.

На рис. 2 приведены кривые плотности потока для трех наборов параметров: (D_0, J_0, b_0) — истинный минимум, $(0,88D_0, J_0, 0,9685b_0)$ — ложный минимум и $(0,85D_0, J_0, 0,9b_0)$ — начальное приближение из окрестности ложного минимума. Значения функционала в точке минимума и начального приближения отличаются на два порядка. Отметим близость плотностей потоков сорбции J_{ads} и десорбции bc^2 — их разность на четыре порядка меньше каждого из них.

Это отвечает квазиравновесию на границе и согласуется с близкими к равновесным условиями, обеспечивающими медленное гидрирование [Bloch, 2003].

Однако отказ от неравновесного граничного условия (2) и замена его на условие I рода выглядят труднореализуемыми, поскольку заранее неизвестно граничное значение концентрации $c(t, L)$ (а его измерение требует высокой точности), в то время как его отличие от равновесного значения (а также изменение во времени этого отличия) и определяет динамику процесса.

На рис. 3 приведены линии уровня нормы градиента при фиксированном $J_{\text{ads}} = J_0$. Хорошо видна цепочка нулей (в пределах вычислительной погрешности) градиента, соответствующим особым точкам функционала (не только минимумам).

На рис. 4 приведены зависимости компонент градиента функционала от отклонения соответствующего параметра, то есть частные производные по параметрам как функции параметров. Поскольку порядки величины параметров существенно различны, коэффициент диффузии представлен в виде $D = Md$, где $M = 8.5 \cdot 10^{-4}$ — масштабный множитель. Все производные монотонно возрастают в указанной окрестности «истинного» значения, что гарантирует сходимость задачи определения одного параметра с начальным приближением из этой окрестности. Проведенные численные эксперименты демонстрируют работоспособность метода, предложенного в статье: метода построения сопряженного оператора для неклассической сеточной параболической краевой задачи — модели гидрирования с измерением плотности эффективного потока сорбции, вычисления точного значения градиента среднеквадратичной невязки в пространстве кинетических параметров и их оценки.

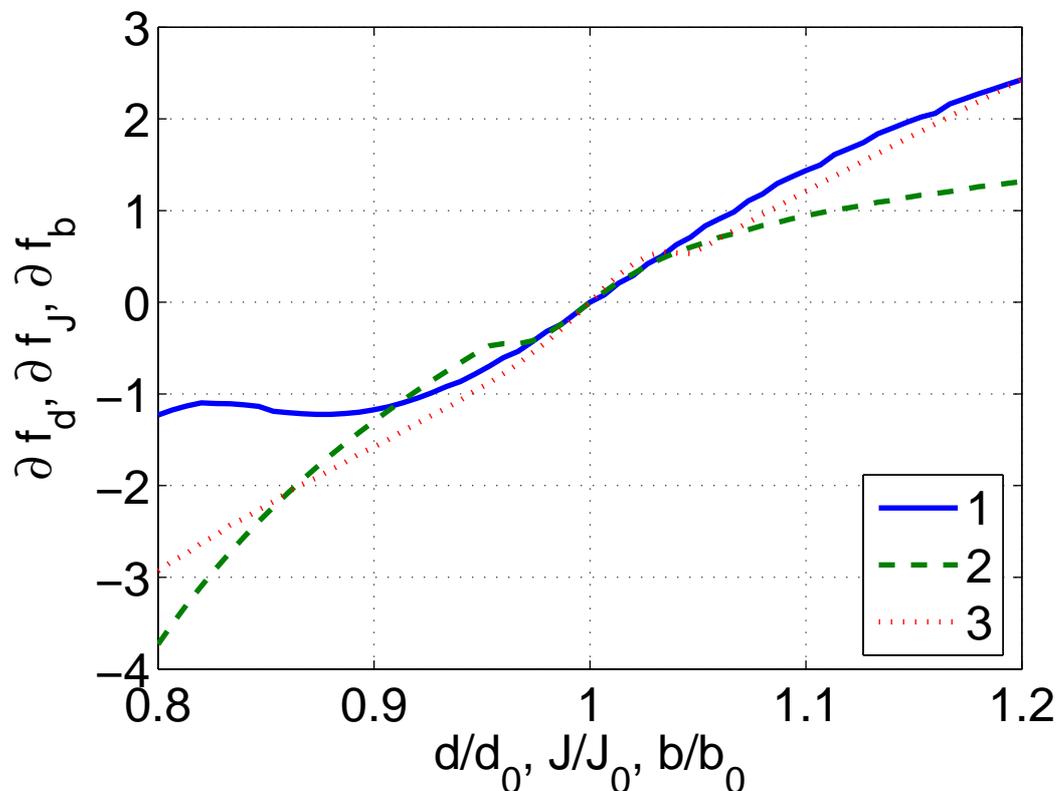


Рис. 4. Зависимость частных производных функционала от соответствующих параметров

Заключение

В работе построены сопряженные задачи для явной и неявной сеточных квазилинейных параболических пространственно-одномерных краевых задач. Решения исходной и сопряженной краевых задач дают возможность получить точное значение градиента функционала в пространстве параметров. Предложены алгоритмы решения задач, в том числе учитывающие возможность параллельного расчета.

Список литературы

- Бахвалов Н., Жидков Н., Кобельков Г.* Численные методы. — М.: Лаборатория базовых знаний, 2000. — 624 с.
- Евтушенко Ю.Г.* Методы решения экстремальных задач и их применение в системах оптимизации. — М.: Наука, 1982. — 432 с.
- Заика Ю.В., Родченкова Н.И.* Диффузионный пик ТДС-спектра дегидрирования: краевая задача с подвижными границами // Математическое моделирование. — 2008. — Т. 20, № 11. — С. 67–79.
- Карташов Э.М.* Аналитические методы в теории теплопроводности твердых тел. — М.: Высшая школа, 2001. — 550 с.
- Марчук Г.И., Агошков В.И., Шутяев В.П.* Сопряженные уравнения и методы возмущений в нелинейных задачах математической физики. — М.: Физматлит, 1993. — 224 с.
- Чернов И.А.* Обобщенное решение одномерной квазилинейной краевой задачи типа гидрирования с нелинейными граничными условиями и эволюцией состояния // Дифференциальные уравнения. — 2011. — Т. 47, № 4. — С. 584–591.
- Чернов И.А.* Математическая модель экзотермичного формирования гидрида // Математическое моделирование. — 2010. — Т. 22, № 1. — С. 3–16.
- Bloch J.* The hydriding kinetics of activated uranium powder under low (near equilibrium) hydrogen pressure // Journal of Alloys and Compounds. — 2003. — V. 361. — P. 130–137.
- Chernov I. A., Bloch J., Voit A. P., Gabis I. E.* Influence of metal powder particle's shape on the kinetics of hydriding // International Journal of Hydrogen Energy. — 2010. — V. 35. — P. 253–258.
- Sakintuna B., Lamari-Darkrim F., Hirscher M., Dogan B.* Metal hydride materials for solid hydrogen storage: a review // International Journal of Hydrogen Energy. — 2007. — V. 32(9). — P. 1121–1140.
- Sluzalec A.* Identification of diffusion parameters in welded joints of titanium and its alloys // Applied Mathematical Modelling. — 2009. — V. 33. — P. 3402–3408.