

С.Р. Туйкина, С.И. Соловьева

О ЧИСЛЕННОМ ОПРЕДЕЛЕНИИ КОЭФФИЦИЕНТОВ НЕКОТОРЫХ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ НЕИЗОТЕРМИЧЕСКОЙ ДИНАМИКИ СОРБЦИИ*

В работе предложены численные методы решения некоторых обратных задач для математических моделей неизоотермической динамики сорбции в случае, когда кинетические коэффициенты зависят от температуры. Методы решения некоторых других обратных задач в неизоотермическом случае предложены в работах [1, 2]. Методам решения обратных задач в изотермическом случае посвящены, например, работы [3, 4], единственность решения этих обратных задач исследуется в работах [5-6].

Неизоотермическая математическая модель динамики сорбции, учитывающая диффузию и внешнедиффузионную кинетику и баланс тепла, имеет вид

$$\nu u_x + a_t + \varepsilon u_t = Du_{xx}, \quad (x, t) \in Q_\tau, \quad (1)$$

$$a_t = \gamma(T)(u - \psi(a)g(T)), \quad (x, t) \in Q_\tau, \quad (2)$$

$$\varepsilon T_t + \nu T_x + qT = \delta a_t + KT_{xx}, \quad (x, t) \in Q_\tau, \quad (3)$$

$$u(0, t) = \mu(t), \quad T(0, t) = T_0, \quad 0 < t \leq \tau, \quad (4)$$

$$u(l, t) + \lambda_1 u_x(l, t) = 0, \quad T(l, t) + \lambda_2 T_x(l, t) = 0, \quad 0 < t \leq \tau, \quad (5)$$

$$u(x, 0) = 0, \quad a(x, 0) = 0, \quad T(x, 0) = T_0, \quad 0 \leq x \leq l, \quad (6)$$

где $u(x, t)$, $a(x, t)$ – концентрации сорбата в растворе и в порах сорбента, $T(x, t)$ – температура сорбата, $\gamma(T)$ – коэффициент внешнедиффузионной кинетики, $\mu(t)$ – входная концентрация, $\psi(a)g(T)$ – функция обратная изотерме сорбции, ν – скорость потока, ε – пористость сорбента, q, δ, D, K – коэффициенты теплообмена, теплопередачи и диффузии, $Q_\tau = \{ (x, t) : 0 \leq x \leq l, 0 < t \leq \tau \}$.

* Работа выполнена при поддержке Российского Фонда
Фундаментальных Исследований (код проекта 08-01-00314)

Функции $\mu(t)$, $g(t)$, $\psi(\xi)$, $\gamma(\xi)$ удовлетворяют следующим условиям:

$$\mu(t), g(t) \in C^1[0, \tau], \mu(0) = 0, \mu'(t) > 0, 0 < g(t) < g_0, t \in [0, \tau], \quad (7)$$

$$\psi(\xi) \in C^1(-\infty, \infty), \psi(0) = 0, \psi(\infty) < C_1, 0 < \psi'(\xi) \leq C_2, \xi \in (-\infty, \infty), \quad (8)$$

$$\gamma(\xi) \in C^1(-\infty, \infty), \gamma(0) = \gamma_0, 0 < \gamma'(\xi) \leq C_3, \xi \in (-\infty, \infty), \quad (9)$$

где $\gamma_0, g_0, C_i, i = 1, \dots, 3$ – положительные постоянные.

Рассмотрим также неизотермическую математическую модель динамики сорбции, учитывающую диффузию и внутридиффузионную кинетику и баланс тепла, в которой уравнение (2) заменим на уравнение

$$a_t = \beta(T)(\varphi(u)g(T) - a), \quad (x, t) \in Q_\tau, \quad (2')$$

где $\varphi(u)g(T)$ – изотерма сорбции и $\varphi(\xi)$ удовлетворяет условию $\varphi(\xi) \in C^1(-\infty, \infty)$, $\varphi(0) = 0$, $\varphi(\infty) < C_1$, $0 < \varphi'(\xi) \leq C_2$, $\xi \in (-\infty, \infty)$ (8')

Сформулируем следующие обратные задачи.

Задача 1. Для заданных функций $\mu(t)$, $\gamma(T)$, $g(T)$ и функции $f(t)$, являющейся дополнительной информацией о решении прямой задачи (1)-(6)

$$f(t) = u(l, t), \quad t \in [0, \tau], \quad (10)$$

определить $\psi(\xi)$, $u(x, t)$, $a(x, t)$, $T(x, t)$, удовлетворяющие (1) -(6), (10).

Задача 2. Для заданных функций $\mu(t)$, $\beta(T)$, $g(T)$ по дополнительной информации (10) о решении прямой задачи определить функции $\varphi(\xi)$, $u(x, t)$, $a(x, t)$, $T(x, t)$, удовлетворяющие (1), (2'), (3)-(6), (10).

Метод решения обратной задачи, основанный на дескриптивной регуляризации с градиентным методом

Пусть точное решение допускает параметризацию $\psi(\xi, \lambda) \in C^{1,1}[G]$, где $G = (-\infty, \infty) \times Q_N$, Q_N – компакт в R^N , соответствие между λ и $\psi(\xi, \lambda)$ взаимнооднозначно, функция $\psi(\xi, \lambda)$ удовлетворяет по ξ условиям (8). Пусть дополнительная информация $f(t)$ задана с погрешностью δ , т.е. известны функции $f_\delta(t)$ такие, что $\|f_\delta(t) - f(t)\|_{L_2[0, T]} \leq \delta$. Чтобы согласовать погрешность экспериментов с точностью обработки их результатов, используем многочлены равномерного приближения Бернштейна

$$\psi(\xi, \lambda) = \sum_{k=0}^N \lambda_k C_N^k (\xi)^k (1 - \xi)^{N-k}, \quad k = 0, \dots, N.$$

Минимизируем невязку

$$S(\lambda) = \int_0^T (u(l,t,\lambda) - f_\delta(t))^2 dt \quad (11)$$

градиентным методом с критерием $S(\lambda) \leq \delta^2$ для окончания процесса минимизации. Здесь $u(x,t,\lambda)$ компонента решения краевой задачи (1)-(6), соответствующая $\psi(\xi, \lambda)g(T), \mu(t), \gamma(\xi)$.

Построим градиент функции $S(\lambda)$. Пусть вектору λ соответствует решение $\{u(x,t,\lambda), a(x,t,\lambda), T(x,t,\lambda)\}$, а вектору $\{\lambda + \Delta\lambda\}$ соответствует решение $\{u(x,t,\lambda + \Delta\lambda), a(x,t,\lambda + \Delta\lambda), T(x,t,\lambda + \Delta\lambda)\}$.

Тогда функции

$$\Delta u(x,t,\lambda,\Delta\lambda) = u(x,t,\lambda + \Delta\lambda) - u(x,t,\lambda),$$

$$\Delta a(x,t,\lambda,\Delta\lambda) = a(x,t,\lambda + \Delta\lambda) - a(x,t,\lambda),$$

$$\Delta T(x,t,\lambda,\Delta\lambda) = T(x,t,\lambda + \Delta\lambda) - T(x,t,\lambda)$$

являются решениями задач

$$\begin{aligned} \varepsilon \Delta u_t + \nu \Delta u_x - \gamma g(\psi_a \Delta a + \psi_\lambda \Delta \lambda) + \gamma_T \Delta T (u - \psi g) - \\ - \gamma \psi g_T \Delta T + \gamma \Delta u + R = D \Delta u_{xx}, \quad 0 < x < l, 0 < t \leq \tau, \end{aligned} \quad (14)$$

$$\begin{aligned} \Delta a_t + \gamma g(\psi_a \Delta a + \psi_\lambda \Delta \lambda) - \gamma_T \Delta T (u - \psi g) + \\ + \gamma \psi g_T \Delta T - \gamma \Delta u - R = 0, \quad 0 \leq x \leq l, 0 < t \leq \tau, \end{aligned} \quad (15)$$

$$\begin{aligned} \varepsilon \Delta T_t + \nu \Delta T_x + q \Delta T = k \Delta T_{xx} + \delta (-\gamma g(\psi_a \Delta a + \psi_\lambda \Delta \lambda) + \\ + \gamma_T \Delta T (u - \psi g) - \gamma \psi g_T \Delta T + \gamma \Delta u + R), \quad 0 < x < l, 0 < t \leq \tau, \end{aligned} \quad (16)$$

$$\Delta u(0,t) = 0, \quad \Delta T(0,t) = 0, \quad 0 < t \leq \tau, \quad (17)$$

$$\Delta u(l,t) + \lambda_1 \Delta u_x(l,t) = 0, \quad \Delta T(l,t) + \lambda_2 \Delta T_x(l,t) = 0, \quad 0 < t \leq \tau, \quad (18)$$

$$\Delta u(x,0) = 0, \quad \Delta T(x,0) = 0, \quad \Delta a(x,0) = 0, \quad 0 \leq x \leq l, \quad (19)$$

где $R = O(\|\Delta\lambda\|^2)$.

Представим приращение невязки

$$\Delta S = S(\lambda + \Delta\lambda) - S(\lambda) = \int_0^\tau \left(2(u(l,t,\lambda) - f_\delta(t)) \Delta u(l,t) + (\Delta u(l,t))^2 \right) dt$$

в более удобном виде. Для этого нам понадобятся задачи, сопряженные к (14)-(19):

$$\varepsilon\alpha_t + v\alpha_x + D\alpha_{xx} + \gamma(-\alpha + \delta\eta + y) = 0, 0 < x < l, 0 \leq t < \tau, \quad (20)$$

$$y_t = \gamma\psi_a g(\delta\eta + y - \alpha), 0 \leq x \leq l, 0 \leq t < \tau, \quad (21)$$

$$\varepsilon\eta_t + v\eta_x + K\eta_{xx} + (\gamma_T(u - \psi g) - \gamma g_T \psi)(-\alpha + \delta\eta + y) - q\eta = 0, 0 < x < l, 0 \leq t < \tau, \quad (22)$$

$$\alpha(0, t) = 0, \quad \eta(0, t) = 0, 0 \leq t < \tau, \quad (23)$$

$$D\alpha_x(l, t) + (v + D/\lambda_1)\alpha(l, t) = 2(u(l, t, \lambda) - f_\delta(t)), 0 \leq t < \tau, \\ K\eta_x(l, t) + (v + K/\lambda_2)\eta(l, t) = 0, 0 \leq t < \tau, \quad (24)$$

$$\alpha(x, \tau) = 0, \eta(x, \tau) = 0, y(x, \tau) = 0, 0 \leq x \leq l \quad (25)$$

Учитывая (14) - (25), получим

$$I = \int_0^\tau \int_0^l \left\{ \alpha(\varepsilon\Delta u_t + v\Delta u_x - \gamma g \psi_a \Delta a + \gamma_T \Delta T(u - \psi g) - \gamma \psi g_T \Delta T + \gamma \Delta u - D\Delta u_{xx}) + \right. \\ \left. + y(\Delta a_t + \gamma g \psi_a \Delta a - \gamma_T \Delta T(u - \psi g) + \gamma \psi g_T \Delta T - \gamma \Delta u) + \right. \\ \left. + \eta(\varepsilon\Delta T_t + v\Delta T_x + q\Delta T - k\Delta T_{xx} - \delta(-\gamma g \psi_a \Delta a + \gamma_T \Delta T(u - \psi g) - \gamma \psi g_T \Delta T + \gamma \Delta u) + \right. \\ \left. + \Delta u(\varepsilon\alpha_t + v\alpha_x + D\alpha_{xx} + \gamma(-\alpha + \delta\eta + y)) + \right. \\ \left. + \Delta a(y_t - \gamma \psi_a g(\delta\eta + y - \alpha)) + \right. \\ \left. + \Delta T(\varepsilon\eta_t + v\eta_x + K\eta_{xx} + (\gamma_T(u - \psi g) - \gamma g_T \psi)(-\alpha + \delta\eta + y) - q\eta) \right\} dx dt = \\ = \int_0^\tau \int_0^l \left\{ (v\alpha\Delta u + v\eta\Delta T - D\alpha\Delta u_x + D\alpha_x\Delta u - K\eta\Delta T_x + K\eta_x\Delta T)_x + \right. \\ \left. + (y\Delta a + \varepsilon\eta\Delta T + \varepsilon\alpha\Delta u)_t \right\} dx dt .$$

Из начальных и граничных условий (17)-(19), (23)-(25) следует, что

$$I = \int_0^\tau (2(u(l, t, \lambda) - f_\delta(t)) \Delta u(l, t) dt.$$

С другой стороны, из уравнений (14)-(16), (20)-(22) имеем

$$I = \int_0^\tau \int_0^l ((\alpha - \delta\eta - y)\gamma g \psi_\lambda \Delta \lambda + \tilde{R}) dx dt.$$

Тогда приращение функционала невязки имеет вид

$$\Delta S = \int_0^\tau \int_0^l ((\alpha - \delta\eta - y)(\gamma g \psi_\lambda \Delta \lambda + \tilde{R}) + (\Delta u(l, t))^2) / l dx dt.$$

Пренебрегая величинами второго порядка малости, получим вид градиента

$$S_{\lambda_j} = \int_0^\tau \int_0^l (\alpha - \delta\eta - y) \gamma g \psi_{\lambda_j} dx dt, \quad 0 \leq j \leq N. \quad (26)$$

Для обратной задачи 2 градиент имеет вид

$$S_{\lambda_j} = \int_0^\tau \int_0^l (-\alpha + \delta\eta + y) \beta g \varphi_{\lambda_j} dx dt, \quad 0 \leq j \leq N,$$

где $\{\alpha, \eta, y\}$ решения сопряженной задачи:

$$\varepsilon \alpha_t + \nu \alpha_x + D \alpha_{xx} + \beta \varphi_u g (-\alpha + \delta\eta + y) = 0, \quad 0 < x < l, \quad 0 \leq t < \tau,$$

$$y_t = \beta (\delta\eta + y - \alpha), \quad 0 \leq x \leq l, \quad 0 \leq t < \tau,$$

$$\varepsilon \eta_t + \nu \eta_x + K \eta_{xx} + ((\beta g)_T \varphi - \beta_T a) (-\alpha + \delta\eta + y) - q \eta = 0, \quad 0 < x < l, \quad 0 \leq t < \tau,$$

$$\alpha(0, t) = 0, \quad \eta(0, t) = 0, \quad 0 \leq t < \tau,$$

$$D \alpha_x(l, t) + (\nu + D / \lambda_1) \alpha(l, t) = 2(u(l, t, \lambda) - f_\delta(t)), \quad 0 \leq t < \tau,$$

$$K \eta_x(l, t) + (\nu + K / \lambda_2) \eta(l, t) = 0, \quad 0 \leq t < \tau,$$

$$\alpha(x, \tau) = 0, \quad \eta(x, \tau) = 0, \quad y(x, \tau) = 0, \quad 0 \leq x \leq l.$$

Метод решения обратной задачи, использующий решения типа бегущей волны

При достаточно больших τ и l возможен режим параллельного переноса фронта концентрации, т.е. у математической модели сорбции могут существовать решения типа бегущей волны $u(x, t) \equiv u(x - \sigma t)$, $a(x, t) \equiv a(x - \sigma t)$, $T(x, t) \equiv T(x - \sigma t)$ в области $\tilde{Q}_\tau = \{(x, t) : x > 0, t > 0\}$, где $\mu(t) = u_0$.

Рассмотрим сначала задачу 1. Сделаем замену переменной $z = x - \sigma t$, тогда функции $u(z)$, $a(z)$, $T(z)$ будут являться решением задачи

$$(\nu - \varepsilon \sigma) u_z - \sigma a_z = D u_{zz}, \quad -\infty < z < +\infty, \quad (27)$$

$$(\nu - \varepsilon \sigma) T_z + q T = -\sigma \delta a_z + K T_{zz}, \quad -\infty < z < +\infty, \quad (28)$$

$$-\sigma a_z = \gamma(T) (u - \psi(a) g(T)), \quad -\infty < z < +\infty, \quad (29)$$

$$\lim_{z \rightarrow -\infty} u(z) = u_0, \quad \lim_{z \rightarrow -\infty} T(z) = T_0, \quad \lim_{z \rightarrow -\infty} a(z) = \varphi(u_0) g(T_0), \quad (30)$$

$$\lim_{z \rightarrow +\infty} u(z) = 0, \quad \lim_{z \rightarrow +\infty} T(z) = T_0, \quad \lim_{z \rightarrow +\infty} a(z) = 0. \quad (31)$$

Перейдем далее от функции $u(z)$ к обратной функции $z(u)$. Так как

$$u_z = \frac{1}{z_u}, \quad u_{zz} = -\frac{z_{uu}}{z_u^3}; \quad a_z = \frac{a_u}{z_u}; \quad T_z = \frac{T_u}{z_u}, \quad T_{zz} = \frac{T_{uu}}{z_u^2} - \frac{T_u z_{uu}}{z_u^3},$$

то уравнения (27)-(31) будут иметь вид:

$$\frac{\nu - \varepsilon\sigma}{z_u} - \frac{\sigma a_u}{z_u} = -D \frac{z_{uu}}{z_u^3}, \quad 0 < u < u_0, \quad (32)$$

$$T_{uu} \frac{K}{z_u^2} - T_u \left(K \frac{z_{uu}}{z_u^3} + \frac{\nu - \varepsilon\sigma}{z_u} \right) - qT = \delta\sigma \frac{a_u}{z_u}, \quad (33)$$

$$-\sigma \frac{a_u}{z_u} = \gamma(T) (u - \psi(a) g(T)). \quad (34)$$

Из уравнения (32) выразим a_u :

$$a_u = \frac{\nu - \varepsilon\sigma}{\sigma} + \frac{D}{\sigma} \cdot \frac{z_{uu}}{z_u^2},$$

$$u\gamma(T) + \sigma \frac{a_u}{z_u}$$

из (34) выразим $\psi(a)$: $\psi(a) = \frac{u\gamma(T) + \sigma \frac{a_u}{z_u}}{g(T)\gamma(T)}$

и подставим выражение для a_u в уравнение (33) для T и в $\psi(a)$.

Окончательно получим

$$T_{uu} \frac{K}{z_u} - T_u \left(K \frac{z_{uu}}{z_u^2} + \nu - \varepsilon\sigma \right) - qT z_u = \delta(\nu - \varepsilon\sigma) + D\delta \frac{z_{uu}}{z_u^2}, \quad (35)$$

$$a_u = \frac{\nu}{\sigma} - \varepsilon + \frac{D}{\sigma} \frac{z_{uu}}{z_u^2}, \quad (36)$$

$$\psi(a) = \frac{1}{g(T)\gamma(T)} \left(u\gamma(T) + \frac{\nu - \varepsilon\sigma}{z_u} + D \frac{z_{uu}}{z_u^3} \right). \quad (38)$$

Аналогично, для задачи 2, используя решения типа бегущей волны, получим явную формулу для искомой функции $\varphi(u)$:

$$\varphi(u) = \frac{a\beta(T) - \sigma a_u}{g(T)\beta(T)},$$

где функции $a(u)$ и $T(u)$ являются решениями уравнений (35) и (36).

Схема вычислительного эксперимента первой обратной задачи состояла в следующем. Для известных функций $\mu(t), \psi(a), g(T), \gamma(T)$ решалась задача (1)-(6) и определялась $f(t) = u(l, t)$. Затем функция $f(t)$ возмущалась $f_\delta(t) = f(t) + \delta s(t)$, где $s(t)$ случайная величина, равномерно распределенная на $[-1, 1]$, $\delta = 0.01$ – погрешность эксперимента. Функции

$f_\delta(t)$ использовались как исходная информация для решения обратной задачи предложенными методами. Численный эксперимент проводился для функций

$$\mathcal{K}(y) = \frac{y+1}{6}; g(y) = 1 + \frac{3y}{1+3y}$$

и параметров $\varepsilon = 0.1, q = 0.1, D = 1, K = 1, \delta = 1$.

На рис. 1 представлены результаты восстановления функции $\psi_{test}(y) = \frac{y}{9-8y}$ градиентным методом. Начальное приближение имело следующий вид $\psi(y) = y/3$.

На рис. 2 приведены результаты восстановления этой же функции методом (36)-(38), использующим решения типа бегущей волны $u(z)$ (рис.3).

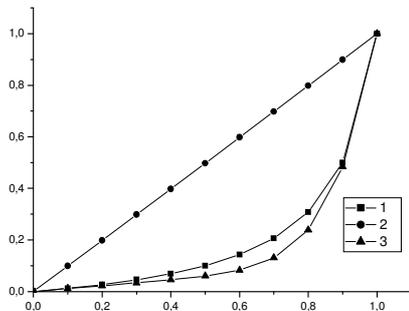


Рис. 1

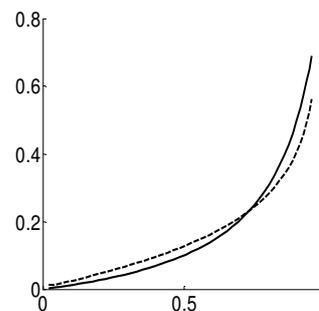


Рис. 2

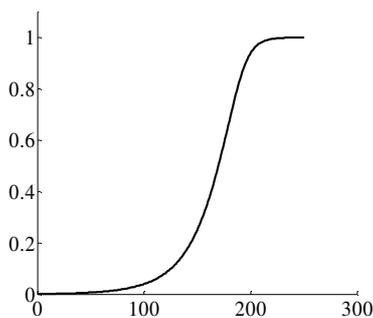


Рис. 3

Аналогично, для обратной задачи 2 сначала для известных функций $\mu(t), \beta(T), g(T), \varphi(u)$ решалась задача (1), (2'), (3)-(6) и определялась функция $f(t) = u(l, t)$. Строилась далее функция $f_\delta(t)$ и она использовалась в качестве исходной информации для решения обратной задачи.

Для решения задачи 2 были также применены оба предложенных метода. На рис. 4 и 5 представлены результаты восстановления функции $\varphi_{test}(y) = \frac{y}{1+2y}$ градиентным методом (рис.4) и методом бегущей волны

(рис.5). Начальное приближение имело следующий вид $\varphi(y)=y/3$,
 $\beta(y)=\frac{y+1}{6}$.

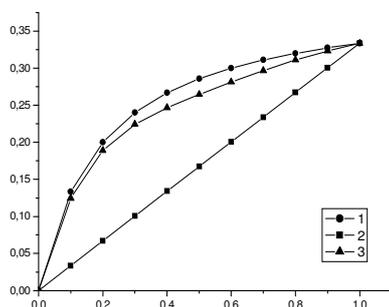


Рис. 4

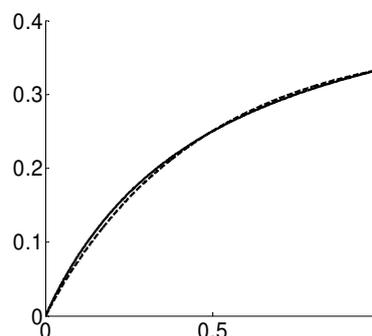


Рис. 5

Приведенные результаты показывают эффективность предложенных алгоритмов решения этой обратной задачи.

На основании проведенных вычислительных экспериментов отметим «плюсы» и «минусы» предложенных методов. Первый метод можно применять при небольших τ и l , но он требует параметризации $\varphi(u)$. Для второго метода требуются большие τ и l , чтобы успел установиться режим параллельного переноса фронта концентрации.

Литература

1. Туйкина С.Р. О численном определении изотермы сорбции в случае неизотермической сорбции // Прикладная математика и информатика. М.: Макс Пресс. 2008. №28. С.37-43.
2. Туйкина С.Р., Соловьева С.И. О численном решении одной обратной задачи неизотермической динамики сорбции // Прикладная математика и информатика. М.: Макс Пресс. 2008. №29. С.56-63.
3. Туйкина С.Р. Численные методы решения некоторых обратных задач динамики сорбции // Вестн. Моск. ун-та. Сер. 15. Вычисл. матем. и киберн., 1998. №4. С.16-19.
4. Денисов А.М., Туйкина С.Р. О решениях типа бегущей волны и их применении для решения обратных задач динамики сорбции // Математические модели и оптимизация вычислительных алгоритмов. М.: Издательство Московского университета. 1993. С.67-74.
5. Денисов А.М. О единственности решения некоторых обратных задач для нелинейных моделей процессов динамики сорбции // Условно-корректные задачи математической физики и анализа. Новосибирск: Наука. 1992. С.73-84.
6. Денисов А.М. Единственность решения задачи определения нелинейного коэффициента системы уравнений в частных производных в малом и целом // Сибирский матем. журнал. 1995. Т.36. №1. С.60-71.