

О ЧИСЛЕННОМ РЕШЕНИИ ОДНОЙ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ НЕИЗОТЕРМИЧЕСКОЙ ДИНАМИКИ СОРБЦИИ*

Для описания сорбционных процессов в колоннах большого диаметра используются математические модели, учитывающие тепловыделение [1-3]. Динамические нелинейные параметры этих моделей (изотерма сорбции, кинетический коэффициент) определяются из решения обратных задач по экспериментальным выходным концентрационным и тепловым кривым. Метод решения некоторых обратных задач в неизотермическом случае для математической модели без учета диффузии предложен в работе [4]. Методам решения обратных задач в изотермическом случае посвящены, например, работы [5, 6], единственность решения этих обратных задач исследуется, например, в работах [7-8].

В данной работе для математической модели сорбции, учитывающие диффузию, внутридиффузионную кинетику и баланс тепла [2, 3], будет рассмотрена обратная задача, состоящая в определении изотермы сорбции и предложены два метода ее численного решения.

Математическая модель неизотермической сорбции

Рассмотрим неизотермическую математическую модель динамики сорбции, учитывающую диффузию и внутридиффузионную кинетику

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

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

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

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

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

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

Здесь $u(x, t)$, $a(x, t)$ – концентрации сорбата в растворе и в порах сорбента, $T(x, t)$ – температура сорбата, $\varphi(u)g(T)$ – изотерма сорбции, $\beta(u)$ – коэффициент внутридиффузионной кинетики, $\mu(t)$ – входная концентрация, ν – это скорость потока, ε – пористость сорбента,

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

q, γ, D, K – это коэффициенты теплообмена, теплопередачи и диффузии,
 $Q_\tau = \{ (x, t) : 0 \leq x \leq l, 0 < t \leq \tau \}$.

Функции $\mu(t)$, $\varphi(\xi)$, $\beta(\xi)$ удовлетворяют следующим условиям

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

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

$$\beta(\xi) \in C^1(-\infty, \infty), \quad \beta(0) = \beta_0, \quad 0 < \beta'(\xi) \leq C_3, \quad \xi \in (-\infty, \infty) \quad (9)$$

где $\beta_0, C_i, i=1, \dots, 3$ – положительные постоянные.

Рассмотрим следующую обратную задачу.

Задача 1. Известны функции $\mu(t)$, $\beta(u)$, $g(T)$ и функция

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

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

Решением обратной задачи (1)-(6), (10) назовем функции $\varphi(\xi)$, $u(x, t)$, $a(x, t)$, $T(x, t)$, удовлетворяющие (1)-(6), (10) такие, что $\varphi(\xi)$ удовлетворяет (8), а функции $u, a, T \in C^1[Q_\tau]$.

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

Предположим, что точное решение допускает параметризацию $\varphi(\xi, \lambda) \in C^{1,1}[G]$, где $G = (-\infty, \infty) \times Q_N$, Q_N – компакт в R^N , соответствие между λ и $\varphi(\xi, \lambda)$ взаимнооднозначно, функция $\varphi(\xi, \lambda)$ удовлетворяет по ξ условиям (8). Пусть дополнительная информация $f(t)$ задана с погрешностью δ , т.е. известны функции $f_\delta(t)$ такие, что $\|f_\delta(t) - f(t)\|_{L_2[0, \tau]} \leq \delta$.

Будем минимизировать невязку

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

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 $\varphi(\xi, \lambda)g(T)$, $\mu(t)$, $\beta(\xi)$.

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

а вектору $\{\lambda + \Delta\lambda\}$ — $\{u(x, t, \lambda + \Delta\lambda), a(x, t, \lambda + \Delta\lambda), T(x, t, \lambda + \Delta\lambda)\}$

Тогда функции

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

$$\begin{aligned}\Delta a(x, t, \lambda, \Delta \lambda) &= a(x, t, \lambda + \Delta \lambda) - a(x, t, \lambda), \\ \Delta T(x, t, \lambda, \Delta \lambda) &= T(x, t, \lambda + \Delta \lambda) - T(x, t, \lambda),\end{aligned}$$

являются решениями задач

$$\begin{aligned}\varepsilon \Delta u_t + \nu \Delta u_x + (\beta \varphi)_u g \Delta u + \beta g_\tau \Delta T \varphi + \beta g \varphi_\lambda \Delta \lambda - \beta_u \Delta u a - \\ - \beta \Delta a + R = D \Delta u_{xx}, \quad 0 < x < l, \quad 0 < t \leq \tau,\end{aligned}\quad (14)$$

$$\begin{aligned}\Delta a_t - (\beta \varphi)_u g \Delta u - \beta g_\tau \Delta T \varphi - \beta g \varphi_\lambda \Delta \lambda + \beta_u \Delta u a + \\ + \beta \Delta a - R_1 = 0, \quad 0 \leq x \leq l, \quad 0 < t \leq \tau,\end{aligned}\quad (15)$$

$$\begin{aligned}\varepsilon \Delta T_t + \nu \Delta T_x + q \Delta T = k \Delta T_{xx} + \gamma (g(\beta \varphi)_u \Delta u + \beta g_\tau \Delta T \varphi + \beta g \varphi_\lambda \Delta \lambda - \\ - \beta_u \Delta u a - \beta \Delta a + R) = 0, \quad 0 < x < l, \quad 0 < t \leq \tau,\end{aligned}\quad (16)$$

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

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

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

где $R = O(\|\Delta \lambda\|^2)$.

Представим приращение невязки

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

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

$$\varepsilon \alpha_t + \nu \alpha_x + D \alpha_{xx} + ((\beta \varphi)_u g - \beta_u a)(-\alpha + \gamma \eta + y) = 0, \quad 0 < x < l, \quad 0 \leq t < \tau, \quad (20)$$

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

$$\varepsilon \eta_t + \nu \eta_x + K \eta_{xx} + \beta g_\tau \varphi(-\alpha + \gamma \eta + y) - q \eta = 0, \quad 0 < x < l, \quad 0 \leq t < \tau, \quad (22)$$

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

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

$$K \eta_x(l, t) + (\nu + K / \lambda_2) \eta(l, t) = 0, \quad 0 \leq t < \tau, \quad (24)$$

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

Учитывая (14)-(25), получим

$$\begin{aligned}I = \int_0^\tau \int_0^l \{ \alpha (\varepsilon \Delta u_t + \nu \Delta u_x + (\beta \varphi)_u g \Delta u + \beta g_\tau \Delta T \varphi - \beta_u \Delta u a - \beta \Delta a - D \Delta u_{xx}) + \\ + y (\Delta a_t - (\beta \varphi)_u g \Delta u - \beta g_\tau \Delta T \varphi + \beta_u \Delta u a + \beta \Delta a) + \\ + \eta (\varepsilon \Delta T_t + \nu \Delta T_x + q \Delta T - k \Delta T_{xx} - \gamma (g(\beta \varphi)_u \Delta u + \beta g_\tau \Delta T \varphi - \beta_u \Delta u a - \beta \Delta a)) + \\ + \Delta u (\varepsilon \alpha_t + \nu \alpha_x + D \alpha_{xx} + ((\beta \varphi)_u g - \beta_u a)(-\alpha + \gamma \eta + y)) + \\ + \Delta a (y_t - \beta(\gamma \eta + y - \alpha)) +\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& +\Delta T(\varepsilon\eta_t + \nu\eta_x + K\eta_{xx} + \beta g_T \varphi(-\alpha + \gamma\eta + y) - q\eta) dxdt = \\
& = \int_0^{\tau} \int_0^l \{(\nu\alpha\Delta u + \nu\eta\Delta T - D\alpha\Delta u_x + D\alpha_x\Delta u - K\eta\Delta T_x + K\eta_x\Delta T)_x + \\
& \quad + (y\Delta\alpha + \varepsilon\eta\Delta T + \varepsilon\alpha\Delta u)_t\} dxdt.
\end{aligned}$$

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

$$I = \int_0^{\tau} \int_0^l ((-\alpha + \gamma\eta + y)\beta g \varphi_\lambda \Delta\lambda + \tilde{R}) dxdt$$

Тогда приращение функционала невязки имеет вид

$$\Delta S = \int_0^{\tau} \int_0^l ((-\alpha + \gamma\eta + y)(\beta g \varphi_\lambda \Delta\lambda + \tilde{R}) + (\Delta u(l, t))^2 / l) dxdt$$

Пренебрегая величинами второго порядка малости, получим вид градиента

$$S_{\lambda_j} = \int_0^{\tau} \int_0^l (-\alpha + \gamma\eta + y)\beta g \varphi_{\lambda_j} dxdt, \quad 0 \leq j \leq N. \quad (26)$$

Остановимся теперь на проблеме задания вида функции $\varphi(\xi, \lambda)$. Чтобы согласовать погрешность экспериментов с точностью обработки их результатов будем использовать функции с увеличивающимся числом параметров N . Одно из возможных представлений – это многочлены равномерного приближения Бернштейна.

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

Для того чтобы функция $\varphi(\xi, \lambda)$ удовлетворяла априорной информации (8) потребуем, чтобы коэффициенты λ_j удовлетворяли следующим условиям

$$\lambda_0 = 0, 0 \leq \lambda_{j+1} - \lambda_j \leq C_2 / N, \lambda_N \leq C_1. \quad (27)$$

Легко проверить, что тогда $\varphi(\xi, \lambda)$ аналитические функции, являющиеся монотонными и ограниченными. Соответствие между λ и $\varphi(\xi, \lambda)$ взаимнооднозначно. Неравенства (27) определяют в R^N выпуклые многогранники Q^N , вершины которых можно выписать явно. Тогда для минимизации функций $S(\lambda)$, на множестве Q^N удобно применить

метод условного градиента. Для параметризации функций $\varphi(\xi, \lambda)$ можно использовать также сплайны.

Метод решения обратной задачи, использующий решения типа бегущей волны

Для процессов фронтальной динамики сорбции при достаточно больших τ и l возможен режим параллельного переноса фронта концентрации, т.е. у математической модели сорбции могут существовать решения типа бегущей волны. Будем искать решения уравнений (1)-(4), (6) в виде $u(x, t) \equiv u(x - \sigma t)$, $a(x, t) \equiv a(x - \sigma t)$, $T(x, t) \equiv T(x - \sigma t)$ в области $\bar{Q}_\tau = \{(x, t) : x > 0, t > 0\}$, где $\mu(t) = u_0$. Сделаем замену переменной $z = x - \sigma t$. Тогда функции $u(z)$, $a(z)$, $T(z)$ являются решением задачи

$$(v - \varepsilon\sigma)u_z - \sigma a_z = Du_{zz}, \quad -\infty < z < +\infty, \quad (28)$$

$$(v - \varepsilon\sigma)T_z + qT = -\sigma\gamma a_z + KT_{zz}, \quad -\infty < z < +\infty, \quad (29)$$

$$-\sigma a_z = \beta(u)(\varphi(u)g(T) - a), \quad -\infty < z < +\infty, \quad (30)$$

$$\lim_{z \rightarrow -\infty} u(z) = u_0, \quad \lim_{z \rightarrow -\infty} T(z) = T_0, \quad \lim_{z \rightarrow -\infty} a(z) = \varphi(u_0)g(T_0), \quad (31)$$

$$\lim_{z \rightarrow +\infty} u(z) = 0, \quad \lim_{z \rightarrow +\infty} T(z) = T_0, \quad \lim_{z \rightarrow +\infty} a(z) = 0. \quad (32)$$

Для того чтобы найти значение скорости волны σ проинтегрируем уравнение (28): $(v - \varepsilon\sigma)u - \sigma a = Du_z + C$

и рассмотрим его при $z \rightarrow \pm\infty$. Из условий (31), (32) и

$$\lim_{z \rightarrow \pm\infty} u_z(z) = 0, \quad \lim_{z \rightarrow \pm\infty} T_z(z) = 0 \quad \text{следует, что } \sigma = \frac{u_0 \cdot v}{u_0 \varepsilon + \varphi(u_0)g(T_0)}.$$

Рассмотрим следующую обратную задачу.

Задача 2. Известны функции $\beta(u)$, $g(T)$ и функция

$$f(t) = u(x^*, t), \quad x^* > 0, t \in [0, \tau]. \quad (33)$$

Требуется определить $\varphi(\xi)$ при $\xi \in (0, u_0)$.

Из условия (33) легко определяется волна $u(z)$ при $z \in (z_1, z_2)$.

Для построения метода решения обратной задачи перейдем 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 (28)-(30) будут иметь вид:

$$\frac{v - \varepsilon\sigma}{z_u} - \frac{\sigma a_u}{z_u} = -D \frac{z_{uu}}{z_u^3}, \quad 0 < u < u_0, \quad (34)$$

$$T_{uu} \frac{K}{z_u^2} - T_u \left(K \frac{z_{uu}}{z_u^3} - \frac{\nu - \varepsilon \sigma}{z_u} \right) - qT = \gamma \sigma \frac{a_u}{z_u}, \quad (35)$$

$$-\sigma \frac{a_u}{z_u} = \beta(u) (\varphi(u) g(T) - a). \quad (36)$$

Из уравнения (34) выразим a_u :

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

Используя данное выражение из уравнения (36) получим формулу для искомой функции $\varphi(u)$:

$$\varphi(u) = \frac{1}{\beta(u)g(T)} \left(\frac{\varepsilon \sigma - \nu}{\sigma} - \frac{D}{\sigma} \cdot \frac{z_{uu}}{z_u^2} \right) + \frac{a}{g(T)},$$

где функция $T(u)$ является решением уравнения (35).

Схема вычислительного эксперимента состояла в следующем. Для известных функций $\mu(t), \beta(u), g(T), \varphi(\xi, \lambda)$ решалась задача (1)-(6) и определялась $f(t)$. 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 обратных задач 1, 2 предложенными методами. Численный эксперимент проводился для функций $\beta(y) = \frac{y+1}{6}$; $g(y) = 1 + \frac{3y}{1+3y}$ и параметров $\varepsilon = 0.1, q = 0.1, D = 1, K = 1, \gamma = 1$.

На рис. 1 представлены результаты восстановления функции $\varphi_{test}(y) = \frac{y}{1+2y}$ градиентным методом. Начальное приближение имело следующий вид $\varphi(y) = y/3$.

Кривая 1 соответствует точным данным, 2 — восстановленным, 3 — начальное приближение.

На рис. 2 приведены результаты восстановления функции $\varphi_{test}(y) = \frac{y}{1+2y}$ методом, использующим решения типа бегущей волны

$u(z)$ (рис.3). Кривая 1 соответствует точным данным, 2 — восстановленным.

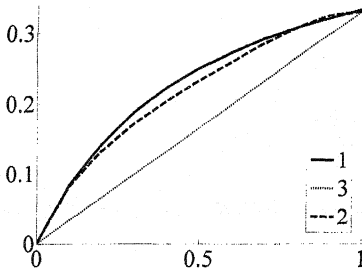


Рис. 1

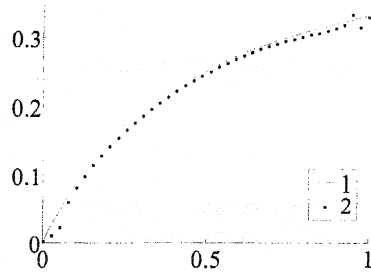


Рис. 2

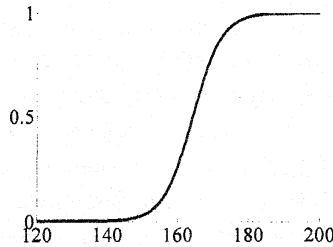


Рис. 3

Приведенные результаты показывают эффективность предложенных алгоритмов решения этой обратной задачи. Первый метод можно применять при небольших τ и l , но он требует параметризации $\varphi(u)$. Второй метод является более быстрым и позволяет без параметризации определять $\varphi(u)$, но для установления режим параллельного переноса фронта концентрации требуется большие τ и l .

Литература

1. Золотарев П.П. Проблемы теории динамики сорбции и хроматографии в неподвижных слоях. //Журн. физ. химии,1985, т.59, с.1342-1351.
2. Цабек Л.К., Розен И.В. //Журн. физ. химии,1978, т.52,с.143.
3. Цабек Л.К. //Инж. физ. журн., 1974, т.27, с.395.
4. Туйкина С.Р. О численном определении изотермы сорбции в случае неизотермической сорбции // Прикладная математика и информатика. М.: Макс Пресс. 2008. №28. с.37-43.
5. 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.
6. 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.
7. 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.
8. 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.