С.Р. Туйкина

О ЧИСЛЕННОМ ОПРЕДЕЛЕНИИ ИЗОТЕРМЫ СОРБЦИИ В СЛУЧАЕ НЕИЗОТЕРМИЧЕСКОЙ СОРБЦИИ*

В химических технологиях широко используются препаративная газоадсорбционная хроматография и адсорберы большого диаметра. В этих условиях процессы сорбции существенно отличаются от изотермических, так как при сорбции происходит тепловыделение. Для описания сорбционных процессов в колоннах используют математические модели, учитывающие различные типы кинетики и баланс тепла [1, 2]. Для оценки эффективности сорбционной системы требуется знание динамических нелинейных параметров этих моделей (изотермы сорбции, коэффициентов кинетики). Эти коэффициенты определяются из решения обратных задач по экспериментальным выходным концентрационным и тепловым кривым. Методам решения обратных задач в изотермическом случае посвящены, например, работы [5, 6], единственность решения этих обратных задач исследуется, например, в работах [3-5].

В данной работе для математических моделей сорбции, учитывающие либо внешнедиффузионную кинетику, либо внутридиффузионную кинетику и баланс тепла [1, 2], будут рассмотрены две обратные задачи, состоящие в определении изотермы сорбции и предложены методы их численного решения.

Математические модели неизотермической сорбции

Рассмотрим неизотермическую математическую модель динамики сорбции, учитывающую внутридиффузионную кинетику

$$\nu u_x + a_t + \varepsilon u_t = 0,\ (x,t)\in Q_\tau, \tag{1}$$

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

$$\varepsilon T_t + h\nu T_x = q a_t,\ (x,t)\in Q_\tau, \tag{3}$$

$$u(0,t) = \mu(t), T(0,t) = T_0\quad 0 < t \le \tau, \tag{4}$$

$$u(x,0) = 0, a(x,0) = 0,\quad T(x,0) = T_0,\ 0 \le x \le l. \tag{5}$$

Здесь $u(x,t)$, $a(x,t)$- концентрации сорбата в растворе, в порах сорбента, $T(x,t)$ – температура сорбата, $\phi(u)g(T)$ – изотерма сорбции, $\beta(T)$ – коэффициент внутридиффузионной кинетики, $\mu(t)$ – входная

* Работа выполнена при поддержке Российского Фонда Фундаментальных Исследований (код проекта 05-01-00232)

концентрация, v – это скорость потока, ε-пористость сорбента и T_0 – начальная температура сорбента, коэффициенты h,q – это соответственно коэффициенты теплоемкости и теплопередачи сорбента, $Q_\tau = \{ (x,t): 0 \le x \le l,\ 0 < t \le \tau \}$.

В случае математической модели динамики сорбции, учитывающей внешнедиффузионную кинетику уравнение (2) заменим на уравнение

$$a_t = \gamma(T)(u - \psi(a)g(T)),\ (x,t) \in Q_\tau, \tag{6}$$

где $\psi(a)g(T)$ – функция, обратная изотерме сорбции, $\gamma(T)$ – коэффициент внутридиффузионной кинетики.

Функции $\mu(t)$, $\psi(\xi)$, $k(\xi)$ удовлетворяют следующим условиям

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

$$\varphi(\xi) \in C^1(-\infty,\infty),\ \varphi(0) = 0,\ C_2 > \varphi(\infty) > \mu(\tau),\ 0 < \varphi'(\xi) \le C_1, \xi \in (-\infty,\infty) \tag{8}$$

$$\psi(\xi) \in C^1(-\infty,\infty),\ \psi(0) = 0,\ C_3 > \psi(\infty) > \mu(\tau),\ 0 < \psi'(\xi) \le C_4, \xi \in (-\infty,\infty) \tag{9}$$

$$\beta(T) = \beta_0 \exp(-\frac{E_\beta}{RT}), g(T) = g_0 \exp(-\frac{E_g}{RT}), \gamma(T) = \gamma_0 \exp(-\frac{E_\gamma}{RT}) \tag{10}$$

где $\beta_{0,} E_\beta, \gamma_{0,} E_\gamma, g_{0,} E_g, R, C_i, i = 1,...4$ – положительные постоянные.

Постановка обратных задач

Будем рассматривать следующие обратные задачи.

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

$$f(t) = u(l,t), k(t) = T(l,t),\ t \in [0,\tau], \tag{11}$$

определить $\varphi(\xi)$, $u(x,t)$, $a(x,t)$, $T(x,t)$, удовлетворяющие (1)-(5), (8).

Решением обратной задачи (1)-(5), (11) назовем функции $\varphi(\xi)$, $u(x,t)$, $a(x,t), T(x,t)$, удовлетворяющие (1)-(5), (11) такие, что $\varphi(\xi)$ удовлетворяет (5) $u,a,T \in C^1[Q\tau]$.

Задача 2. Известны функции $\mu(t)$, $\gamma(T), g(T)$ и

$$f(t) = u(l,t), k(t) = T(l,t),\ t \in [0,\tau], \tag{12}$$

определить $\psi(\xi)$, $u(x,t)$, $a(x,t)$, $T(x,t)$, удовлетворяющие (1), (3)-(6), (12).

Решением обратной задачи (1), (3)-(6), (12) назовем функции $\psi(\xi)$, $u(x,t)$, $a(x,t), T(x,t)$, удовлетворяющие (1), (3)-(6), (12) такие, что $\psi(\xi)$ удовлетворяет (9) $u,a,T \in C^1[Q_\tau]$.

Численный метод решения обратных задач

Рассмотрим теперь алгоритм приближенного решения первой обратной задачи, использующий предположение о том, что точное решение допускает параметризацию $\varphi(\xi,\lambda)\in C^{1,1}[G]$, $G=(-\infty,\infty)\times Q_N$, Q_N – компакт в R^N. Функция $\varphi(\xi,\lambda)$ удовлетворяет априорным условиям (8), которые обеспечивают ее монотонность, ограниченность и положительность. Будем дополнительно предполагать, что соответствие между λ и $\varphi(\xi,\lambda)$ взаимнооднозначно. Тогда при известных функциях $\mu(t),\beta(t),g(t)$ задача (1)-(5) определяет оператор $A\lambda=\{f(t),k(t)\}$. Пусть дополнительная информация $\{f(t),k(t)\}$ задана с погрешностью δ, т.е. известны функции $f_\delta(t)$ такие, что $\|f_\delta(t)-f(t)\|_{L_2[0,T]}\le\delta, \|k_\delta(t)-k(t)\|_{L_2[0,T]}\le\delta$. Будем минимизировать невязку

$$S(\lambda)=\int_0^T((u(l,t,\lambda)-f_\delta(t))^2+(T(l,t,\lambda)-k_\delta(t))^2)dt \tag{13}$$

градиентным методом с критерием $S(\lambda)\le\delta^2$ для окончания процесса минимизации. Здесь $u(x,t,\lambda)$, $T(x,t,\lambda)$ компоненты решения краевой задачи (1)-(5), соответствующие $\varphi(\xi,\lambda),\mu(t),\beta(T),g(T)$.

Построим градиент функции $S(\lambda)$. Пусть λ соответствует решение

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

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

Тогда функции

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

являются решениями задач

$$\varepsilon\Delta u_t+v\Delta u_x+\beta g\varphi_u\Delta u+(\beta g)'\Delta T(\varphi-a)+\beta g\varphi_\lambda\Delta\lambda-$$
$$-\beta\Delta a+R=0,\ 0<x\le l,\ 0<t\le\tau, \tag{14}$$
$$\Delta a_t-\beta g\varphi_u\Delta u-(\beta g)'\Delta T(\varphi-a)-\beta g\varphi_\lambda\Delta\lambda+\beta\Delta a-$$
$$-R=0,\ 0\le x\le l, 0<t\le\tau, \tag{15}$$
$$\varepsilon\Delta T_t+h\Delta T_x=q(\beta g\varphi_u\Delta u+(\beta g)'\Delta T(\varphi-a)+\beta g\varphi_\lambda\Delta\lambda-$$
$$-\beta\Delta a+R)=0,\ 0<x\le l,\ 0<t\le\tau, \tag{16}$$
$$\Delta u(0,t)=0,\quad \Delta T(0,t)=0, 0<t\le\tau, \tag{17}$$
$$\Delta a(x,0)=0,\quad 0\le x\le l, \tag{18}$$

где $R=O(\|\Delta\lambda\|^2)$

Представим приращение невязки

$\Delta S=S(\lambda+\Delta\lambda)-S(\lambda)=$

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

в более удобном виде. Для этого нам понадобятся задачи сопряженные к (14) - (18)

$$\varepsilon\alpha_t + \nu\alpha_x + \beta g\varphi_u(-\alpha + \eta + qy) = 0, \quad 0 \le x < l, \quad 0 \le t < \tau, \tag{19}$$

$$\eta_t = \beta(\eta + qy - \alpha), \quad 0 \le x \le l, \quad 0 \le t < \tau, \tag{20}$$

$$\varepsilon y_t + hy_x + (\beta g)'(\varphi - a)(-\alpha + \eta + qy), 0 \le x < l, 0 \le t < \tau, \tag{21}$$

$$\nu\alpha(l,t) = 2(u(l,t,\lambda) - f_\delta(t)), 0 \le t < \tau, \tag{22}$$

$$hy(l,t) = 2(T(l,t,\lambda) - k_\delta(t)), 0 \le t < \tau\ , \tag{23}$$

$$\alpha(x,\tau) = 0, \quad \eta(x,\tau) = 0, \quad y(x,\tau) = 0, \quad 0 \le x \le l \tag{24}$$

Учитывая (14)- (18) , получим

$$I = \int_0^\tau \int_0^l \{\alpha(\varepsilon\Delta u_t + \nu\Delta u_x + \beta g\varphi_u\Delta u + (\beta g)'\Delta T(\varphi - a) - \beta\Delta a) +$$

$$+\eta(\Delta a_t - \beta g\varphi_u\Delta u - (\beta g)'\Delta T(\varphi - a) + \beta\Delta a\ ) +$$

$$+y(\varepsilon\Delta T_t + h\,\Delta T_x - q(\beta g\varphi_u\Delta u + (\beta g)'\Delta T(\varphi - a) - \beta\Delta a)) +$$

$$+\Delta u(\varepsilon\alpha_t + \nu\alpha_x + \beta g\varphi_u(-\alpha + \eta + qy)) + +\Delta a(\eta_t - \beta(\eta + qy - \alpha)) +$$

$$+\Delta T(\varepsilon y_t + hy_x + (\beta g)'(\varphi - a)(-\alpha + \eta + qy))\} dxdt =$$

$$= \int_0^\tau \int_0^l \{(\nu\alpha\Delta u + hy\Delta T)_x + (\eta\Delta a + \varepsilon y\Delta T)_t\} dxdt\,\Delta$$

Из начальных и граничных условий (17), (18), (22) - (24) следует, что

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

С другой стороны из уравнений (14)-(16), (19)-(21) получим

$$I = \int_0^\tau \int_0^l ((\eta - \varepsilon\alpha + qy)\beta g\varphi_\lambda\Delta\lambda + R) dxdt$$

Тогда приращение функционала невязки имеет вид

$$\Delta S = \int_0^\tau \int_0^l ((\eta - \varepsilon\alpha + qy)(\beta g\varphi_\lambda\Delta\lambda + R) + (\Delta u(l,t))^2 + (\Delta T(l,t))^2)/l) dxdt$$

Пренебрегая величинами второго порядка малости, получим вид градиента

$$S_{\lambda_j} = \int_0^\tau \int_0^l ((\eta - \varepsilon\alpha + qy)\beta g\varphi_\lambda)dxdt, 0 \le j \le N \qquad (25)$$

Аналогично для второй задачи предположим, что точное решение допускает параметризацию $\psi(\xi,d) \in C^{1,1}[G]$, $G = (-\infty,\infty) \times Q_N, Q_N$ – компакт в R^N.

Будем минимизировать невязку

$$S_1(d) = \int_0^T ((u(l,t,d) - f_\delta(t))^2 + (T(l,t,d) - k_\delta(t))^2)dt$$

градиентным методом с критерием $S_1(d) \le \delta^2$ для окончания процесса минимизации. Здесь $u(x,t,d)$, $T(x,t,d)$ компоненты решения краевой задачи (1), (3)-(6), соответствующие $\psi(\xi,d), \mu(t), \gamma(T), g(T)$.

Тогда градиент невязки имеет вид

$$S_{1d_j} = \int_0^\tau \int_0^l ((\alpha - \eta - qy)\gamma g\psi_d)dxdt, 0 \le j \le N,$$

где α, η, y решения сопряженной задачи

$$\varepsilon\alpha_t + v\alpha_x + \gamma g(\alpha - \eta - qy) = 0,\ 0 \le x < l,\ 0 \le t < \tau,$$
$$\eta_t = \gamma g\psi_a(-\eta - qy + \alpha),\ 0 \le x \le l,\ 0 \le t < \tau,$$
$$\varepsilon y_t + hy_x + (\gamma g)'(u - \psi)(\alpha - \eta - qy),\ 0 \le x < l,\ 0 \le t < \tau,$$
$$v\alpha(l,t) = 2(u(l,t,\lambda) - f_\delta(t)),\ 0 \le t < \tau,$$
$$h\, y(l,t) = 2(T(l,t,\lambda) - k_\delta(t)),\ 0 \le t < \tau,$$
$$\alpha(x,\tau) = 0, \eta(x,\tau) = 0, y(x,\tau) = 0,\ 0 \le x \le l$$

Остановимся теперь на проблеме задания вида функций $\varphi(\xi,\lambda), \psi(\xi,d)$. 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.

$$\varphi(\xi,\lambda) = \sum_{k=0}^N \lambda_k \phi_k^N, \psi(\xi,d) = \sum_{k=0}^N d_k \phi_k^N, \text{ где } \phi_k^N = C_N^k(\xi/l)^k(1-\xi/l)^{N-k}, k = 0,\dots,N$$

Для того, чтобы функции $\varphi(\xi,\lambda), \psi(\xi,d)$ удовлетворяли априорной информации (8) потребуем, чтобы

$$\lambda_0 = 0, 0 \le \lambda_{j+1} - \lambda_j \le C_2/N, \lambda_N \le C_1, d_0 = 0, 0 \le d_{j+1} - d_j \le C_4/N, d_N \le C_3. \qquad (26)$$

Легко проверить, что тогда $\varphi(\xi,\lambda), \psi(\xi,d)$ аналитические функции, являющиеся монотонными и ограниченными. Соответствие между λ и $\varphi(\xi,\lambda)$ и между d и $\psi(\xi,d)$ взаимно однозначно. Неравенства (26) определяют в R^N выпуклые многогранники Q^N, D^N, вершины которых можно выписать явно. Тогда для минимизации функций $S(\lambda), S_1(d)$, на множествах Q^N, D^N удобно применить метод условного градиента. Для параметризации функций $\varphi(\xi,\lambda), \psi(\xi,d)$ можно использовать также сплайны.

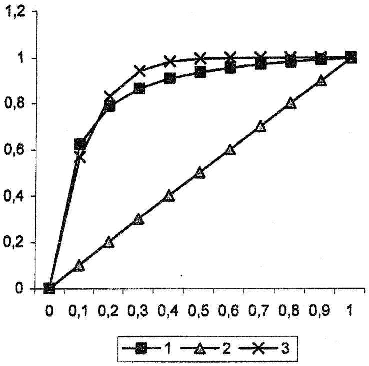

Рис. 1

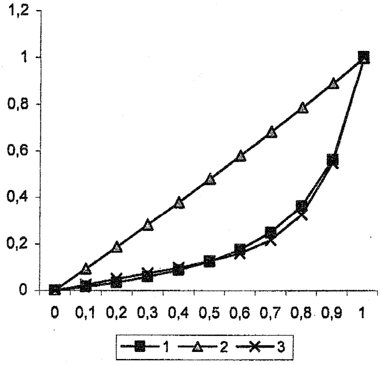

Рис. 2

Схема вычислительного эксперимента состояла в следующем. Для известных функций $\mu(t), \beta(t), g(t), \varphi(\xi,\lambda)$, решалась задача (1)-(5) и определялась $\{f(t),k(t)\}$. Затем функции $\{f(t),k(t)\}$ возмущалась $f_\delta(t) = f(t) + \delta s(t), k_\delta(t) = k(t) + \delta s(t)$ где $s(t)$ случайная величина, равномерно распределенная на $[-1,1]$, $\delta = 0.02$-погрешность эксперимента. Функции $f_\delta(t), k_\delta(t)$ использовались как исходная информация для решения обратных задач 1, 2 предложенными методами. Были взяты функция $\mu(t) = 1-(t-0,8)^2/0.64$ для $t \le 0.8$ и $\mu(t)=1$ для $t > 0.8$ и параметры $\beta_0 = 0.6, E_\beta = 0.7, g_0 = 1, E_g - 1.5, R = 8.31, q = 1$. Число параметров в многочлене Бернштейна равно $N = 8$. На рис.1 приведены результаты восстановления функции $\varphi(\xi) = \dfrac{15\xi}{1+14\xi}$. Начальное приближение имело следующий вид $\varphi(\xi) = \xi$. Кривая 1 соответствует точным данным, 3- восстановленным градиентным методом для задачи 1, 2- начальное приближение.

Аналогично градиентным методом решалась задача 2.

На рис.2 приведены результаты восстановления функции $\psi(\xi) = \dfrac{\xi}{7-6\xi}$, если начальное приближение имело следующий вид $\psi(\xi) = \xi$, а $\mu(t)$ взята такой же, как в задаче 1, параметры равны

$\gamma_0 = 0.7, E_\gamma = 0.6$. Кривая 1 соответствует точным данным, 3-восстановленным, 2- начальное приближение. Приведенные результаты показывают эффективность предложенного алгоритма решения этой обратной задачи.

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. Движение смеси через пористые среды с учетом выделения тепла. //Инж. физ. журн., 1977, т.32, С. 917.
3. 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.
4. 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.
5. Туйкина С.Р. Обратные задачи для одной математической модели ионообмена в случае сжимаемости ионита //Прикладная математика и информатика.М.:Макс Пресс. 2001. №7. С.73-81.
6. 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.