С.Р. Туйкина

О ЧИСЛЕННОМ ОПРЕДЕЛЕНИИ ДВУХ ХАРАКТЕРИСТИК СОРБЕНТА ПО ДИНАМИЧЕСКИМ ИЗМЕРЕНИЯМ.[1]

Сорбционные и ионообменные процессы широко применяются в разнообразных технологических процессах и химическом анализе. Для описания ионообменных и сорбционных процессов в колоннах используют математические модели, учитывающие различные типы кинетики, продольную диффузию [1-3]. При их анализе возникает необходимость определения некоторых характеристик процесса (изотерма сорбции, кинетический коэффициент, коэффициент диффузии). Они являются коэффициентами квазилинейной системы уравнений в частных производных, определяющей данную модель динамики сорбции и, как правило, описываются функциями, зависящими от концентрации вещества, то есть от функции, являющейся одной из компонент решения начально-краевой задачи для квазилинейной системы уравнений в частных производных. Экспериментальные методы непосредственного определения изотермы сорбции и кинетического коэффициента достаточно трудоемки и требуют длительного времени, а в ряде случаев невозможны. Наиболее доступной информацией в ходе сорбционного процесса является динамическая кривая, представляющая собой концентрацию вещества в фиксированных точках сорбционной колонки во все моменты времени. Таким образом, возникают обратные задачи, состоящие в определении, зависящих от решения коэффициентов квазилинейной системы уравнений в частных производных, по дополнительной информации о решения начально-краевой задачи, заданной в фиксированной точке пространства во все моменты времени.

В работах [4-7] рассмотрены методы решения обратных задач определения одной из этих характеристик, единственность решения таких обратных задач исследуется, например, в работах [8-10].

Обратные задачи одновременного определения двух коэффициентов по динамическим кривым, полученным из двух экспериментов на границе, и методы их решения изучены в работах [10-13].

В данной работе для математической модели, учитывающей внешнедиффузионную кинетику, рассмотрена обратная задача определения функции, обратной к изотерме, и кинетического коэффициента по двум выходным динамическим кривым, полученным в двух точках в одном эксперименте. Для этой обратной задачи предлагается итерационный метод решения градиентного типа с использованием техники сопряженных задач, и приводятся результаты

[1] Работа выполнена при частичной поддержке Российского Фонда Фундаментальных Исследований (код проекта **17-01-00525**)

вычислительных экспериментов, позволяющие оценить эффективность предложенного метода.

Постановка обратной задачи

Рассмотрим математическую модель сорбции с внешнедиффузионной кинетикой, не учитывающую продольную диффузию, в случае, когда кинетический коэффициент зависит от концентрации

$$vu_x + \varepsilon u_t + a_t = 0,\ (x,t) \in Q_T, \tag{1}$$

$$a_t = \beta(u)(u - \psi(a)),\ 0 \le x \le l,\ 0 < t \le T, \tag{2}$$

$$u(0,t) = \mu(t),\ 0 < t \le T, \tag{3}$$

$$u(x,0) = 0, a(x,0) = 0,\ 0 \le x \le l. \tag{4}$$

Здесь $u(x,t)$, $a(x,t)$ - концентрации сорбируемого вещества в порах сорбента и в сорбенте, $\psi(\xi)$ - функция обратная изотерме сорбции, $\beta(\xi)$ - кинетический коэффициент, $\mu(t)$ - входная концентрация сорбируемого вещества. $Q_T = \{(x,t),\ 0 < x < l,\ 0 < t \le T\}$

Пусть функции $\mu(t), \psi(\xi), \beta(\xi)$ удовлетворяют следующим условиям

$$\mu(t) \in C^1[0,T],\ \mu(0) = 0,\ \mu'(t) > 0,\ t \in [0,T], \tag{5}$$

$$\psi(\xi) \in C^2(-\infty,\infty), \psi(0) = 0, \psi(\infty) < C_1,$$
$$0 < \psi'(\xi) \le C_2, \xi \in (-\infty,\infty) \tag{6}$$

$$\beta(\xi) \in C^2(-\infty,\infty),\ 0 < C_3 \le \beta(\xi) \le C_4,$$
$$0 \le \beta'(\xi) \le C_5, \xi \in (-\infty,\infty) \tag{7}$$

где $C_i, i = 1{,}5$ - положительные постоянные.

При выполнении этих условий аналогично работам [8, 9] доказывается, что существует единственное решение задачи (1)-(4) $\{u(x,t), a(x,t)\} \in C^1[Q_T]\}$ такое, что

$$0 \le u(x,t) \le \mu(t),\ 0 \le a(x,t) \le \psi^{-1}(\mu(\tau)),\ (x,t) \in Q_\tau,$$
$$u_t(x,t) > 0,\ a_t(x,t) > 0,\ a_x(x,t) < 0,\ 0 \le x \le l,\ 0 < t \le T.$$

Будем рассматривать следующую обратную задачу.

Известны функция $\mu(t)$, удовлетворяющая условию (5) и функции

$$f_i(t) = u(x_i,t),\ i = 1{,}2,\ t \in [0,T], x_1 \in (0,l), x_2 = l \tag{8}$$

определить $\psi(\xi), \beta(\xi), u(x,t), a(x,t)$, удовлетворяющие (1)-(4), (8).

Решением обратной задачи (1)-(4), (8) назовем функции $\psi(\xi), \beta(\xi),\ u(x,t), a(x,t)$, удовлетворяющие (1)-(4), (8) такие, что $\psi(\xi)$ удовлетворяет (6), $\beta(\xi)$ удовлетворяет (7) и $u, a \in C^1[Q_T]$.

Численный метод решения

Для решения обратной задачи применим итерационный метод градиентного типа. Будем предполагать, что точное решение допускает параметризацию $\psi(\xi,\lambda) \in C^2[(-\infty,\infty)\times\Lambda_N]$, $\beta(\xi,d) \in C^2[(-\infty,\infty)\times D_N]$, Λ_N, D_N – компакты в R^N. Функции $\psi(\xi,\lambda)$, $\beta(\xi,d)$ удовлетворяют по ξ условиям (6), (7), которые обеспечивают их положительность, ограниченность и монотонность. Будем дополнительно предполагать, что соответствие между λ и $\psi(\xi,\lambda)$, d и $\beta(\xi,d)$ взаимно однозначно.

Тогда задача (1)-(4) определяет непрерывный и взаимно однозначный оператор из $\Lambda_N \times D_N$ в $L_2[0,T]\times L_2[0,T]$
$A\{\lambda,d\} = \{\bar f_1, \bar f_2\}$

Пусть дополнительная информация (8) задана с погрешностью δ, т.е. известны функции $f_{i\delta}(t)$ такие, что $\sum_{i=1}^{2}\left\| f_{i\delta}(t) - \bar f_i(t)\right\|_{L_2[0,T]} \le \delta$, а для $\bar f_i(t)$ существуют векторы $\{\overline{\lambda}, \overline{d}\}$, такие что $A\{\overline{\lambda}, \overline{d}\} = \{\bar f_1, \bar f_2\}$.

В качестве приближенного решения будем рассматривать функции $\psi(\xi,\lambda_\delta)$, $\beta(\xi,d_\delta)$ $u_\delta(x,t), a_\delta(x,t)$ такие, что

$$\sum_{i=1}^{2}\left\| A\{\lambda_\delta, d_\delta\} - f_{i\delta}(t)\right\|_{L_2[0,T]} \le \delta, \tag{9}$$

Для нахождения приближенного решения обратной задачи рассмотрим вариационную задачу нахождения минимума невязки $S(\lambda,d) = \sum_{i=1}^{2}\int_0^T (u(x_i,t,\lambda,d) - f_{i\delta}(t))^2\,dt, x_1 = l, x_1 = x_*$ на $\Lambda_N \times D_N$ с критерием (9) для окончания процесса минимизации.

Построим градиент функции $S(\lambda,d)$. Пусть векторам λ, d соответствует решение $u(x,t,\lambda,d), a(x,t,\lambda,d)$, а векторам $\lambda+\Delta\lambda, d+\Delta d$ — $u(x,t,\lambda+\Delta\lambda,d+\Delta d), a(x,t,\lambda+\Delta\lambda,d+\Delta d)$

Тогда функции

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

являются решениями задачи

$$\begin{aligned} &\varepsilon\Delta u_t + \nu\Delta u_x + \beta(\Delta u - \psi_a\Delta a - \psi_\lambda\Delta\lambda) + \\ &\quad + (\beta_u\Delta u + \beta_d\Delta d)(u - \psi(a,\lambda)) + R = 0,\ (x,t)\in Q_T, \end{aligned} \tag{10}$$

$$\begin{gathered} \Delta a_t = \beta(\Delta u - \psi_a\Delta a - \psi_\lambda\Delta\lambda) + (\beta_u\Delta u + \beta_d\Delta d)(u - \psi(a,\lambda)) + R = 0, \\ 0 \le x \le l, 0 < t \le T, \end{gathered} \tag{11}$$

$$\Delta u(0,t)=0,\ \ 0<t\le T, \tag{12}$$

$$\Delta u(x,0)=0, \Delta a(x,0)=0,\ \ 0\le x\le l, \tag{13}$$

где $R=O(\|\Delta\lambda\|^2+\|\Delta d\|^2)$.

Приращение невязки равно

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

$$=\sum_{i=1}^{2}\int_0^T(2(u(x_i,t,\lambda,d)-f_{i\delta}(t))\Delta u(x_i,t)+(\Delta u(x_i,t))^2)dt.$$

Представим приращение невязки в более удобном виде. Рассмотрим задачу, сопряженную к (10)-(13)

$$\varepsilon\alpha_{it}+\nu\alpha_{ix}+(\beta(u,d)+\beta_u(u,d))(u-\psi(a,\lambda))(\eta_i-\alpha_i)=0,\ (x,t)\in Q_T, \tag{14}$$

$$\eta_{it}=\beta(u,d)\psi_a(a,\lambda))(\eta_i-\alpha_i)\ ,0\le x\le l, 0\le t<T, \tag{15}$$

$$\nu\alpha_i(x_i,t)=2(u(x_i,t,\lambda,d)-f_{i\delta}(t)),\ \ 0\le t<T, \tag{16}$$

$$\alpha_i(x,T)=0, \eta_i(x,T)=0,\ 0\le x\le l. \tag{17}$$

Учитывая (10)- (17) , получим

$$\begin{aligned}I=\sum_{i=1}^{2}\int_0^T\int_0^{x_i}\{&\alpha_i(\varepsilon\Delta u_t+\nu\Delta u_x+\beta(\Delta u-\psi_a\Delta a)+\beta_u\Delta u(u-\psi(a,\lambda))+\\&+\eta_i(\Delta a_t-\beta(\Delta u-\psi_a\Delta a\ )-\beta_u\Delta u(u-\psi(a,\lambda))+\Delta u(\varepsilon\alpha_{it}+\nu\alpha_{ix}+\\&+(\beta+\beta_u(u-\psi(a,\lambda))(\eta_i-\alpha_i))+\Delta a(\eta_{it}-\beta\psi_a(\eta_i-\alpha_i))\}dxdt=\\=\sum_{i=1}^{2}\int_0^T\int_0^{x_i}\{&(\varepsilon\alpha_i\Delta u+\eta_i\Delta a)_t+(\nu\Delta u\alpha_i)_x\}dxdt.\end{aligned}$$

Из начальных и граничных условий (12)-(13), (16)-(17) следует, что

$$I=\sum_{i=1}^{2}\int_0^T 2(u(x_i,t,\lambda,d)-f_{i\delta}(t))\Delta u(x_i,t)dt$$

С другой стороны, из уравнений (10)-(11), (16)-(17) имеем

$$I=\sum_{i=1}^{2}\int_0^T\int_0^{x_i}\{(\beta\psi_\lambda\Delta\lambda-\beta_d\Delta d(u-\psi(a,\lambda))(\alpha_i-\eta_i)+R\}dxdt$$

Тогда приращение функционала невязки имеет вид

$$\Delta S=\sum_{i=1}^{2}\int_0^T\int_0^{x_i}\{(\beta\psi_\lambda\Delta\lambda-\beta_d\Delta d(u-\psi(a,\lambda))(\alpha_i-\eta_i)+(\Delta u)^2+R\}dxdt$$

Пренебрегая величинами второго порядка малости, получим градиент

$$S_{\lambda_r}=\sum_{i=1}^{2}\int_0^T\int_0^{x_i}\beta(u,d)\psi_{\lambda_k}(a,\lambda)(\alpha_i-\eta_i)\ dxdt, 0\le k\le N_1$$

$$S_{d_j}=\sum_{i=1}^{2}\int_0^T\int_0^{x_i}\beta_{d_j}(u-\psi(a,\lambda))(\eta_i-\alpha_i)\ dxdt, 0\le j\le N_2.$$

Функции будем искать в виде многочленов Бернштейна

$$\psi(\xi,\lambda)=\sum_{k=0}^{N}\lambda_k C_N^k \xi^k (1-\xi)^{N-k}, \lambda_0=0, \lambda_k\le\lambda_{k+1}, \lambda_N>0,$$

$$\beta(\xi,d)=\sum_{k=0}^{N}d_k C_N^k \xi^k (1-\xi)^{N-k}, d_0=\beta(0), d_k\le d_{k+1}, d_N>0.$$

Нетрудно проверить, что соответствие между λ и $\psi(\xi,\lambda)$, d и $\beta(\xi,d)$ взаимно однозначно. Множества Λ_N, D_N представляют собой выпуклые многогранники в R^N, вершины которых можно выписать явно. Для минимизации $S(\lambda,d)$ удобно использовать метод условного градиента.

Вычислительные эксперименты

Вычислительный эксперимент, позволяющий исследовать эффективность предложенных методов, проводился при следующих условиях. Для известных функций $\psi(\xi),\beta(\xi)$ с заданной входной концентрацией $\mu(t)$, решалась задача (1)-(4) и определялись $f_1(t)=u(l,t), f_2(t)=u(0.5l,t), t\in[0,T]$. Найденные функции $f_i(t)$ использовались затем в качестве "точных выходных кривых", для моделирования "экспериментальных данных" в них вносилась погрешность δ=0.02, такая что $\sum_{i=1}^{2}\left\|f_{i\delta}(t)-\bar{f}_i(t)\right\|_{L_2[0,T]}\le\delta$. Функции $f_{i\delta}(t)$ использовались как исходная информация для решения обратных задач определения $\psi(\xi),\beta(\xi)$ методом условного градиента. Входная концентрация равна $\mu(t)=1-(t-0{,}8)^2/0.64$ для $t\le 0.8$ и $\mu(t)=1$ для $t>0.8$, а параметры были равны: $\nu=3, l=1, T=1$, число параметров в многочлене Бернштейна равно N=8. Во всех модельных задачах численное решение краевых задач проводилось на пространственно-временной сетке 51x51 узлов методом конечных разностей.

Заметим, что из-за нелинейности оператора A данный метод чувствителен к выбору начального приближения. Результаты модельных расчетов показали, что в качестве начального приближения для функции, обратной изотерме, $\psi(\xi)$ лучше брать функции, лежащие ниже истинного решения, а в качестве начального приближения для кинетического коэффициента $\beta(\xi)$ - константы

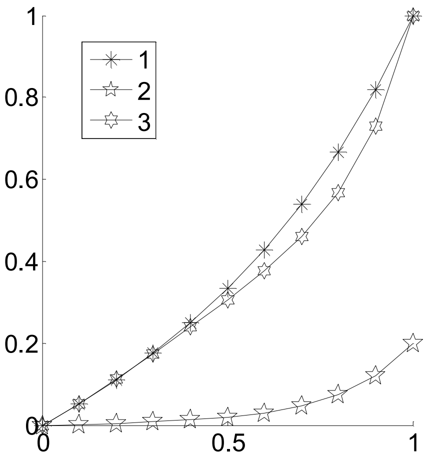

Рис.1

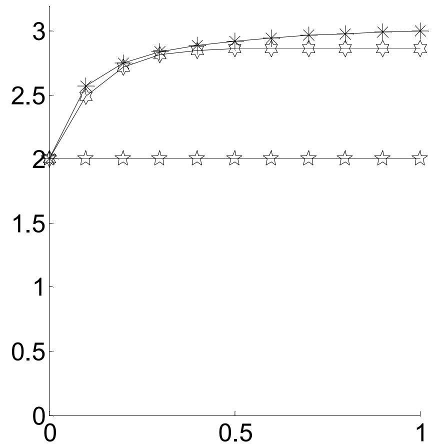

Рис.2

На рис.1 приведены результаты восстановления функции $\psi(\xi) = \xi/(2-\xi)$. На рис.2 приведены результаты восстановления кинетического коэффициента $\beta(\xi) = 2 + \dfrac{12\xi}{1+11\xi}$. Начальные приближения имели следующий вид: $\psi_0(\xi) = 0.2\xi/(12-11\xi)$, $\beta(\xi) = 2$. Цифрой 1 отмечена точная функция, 2 - начальное приближение, 3 - восстановленная функция. Была получена следующая невязка: $S = 0.01952$

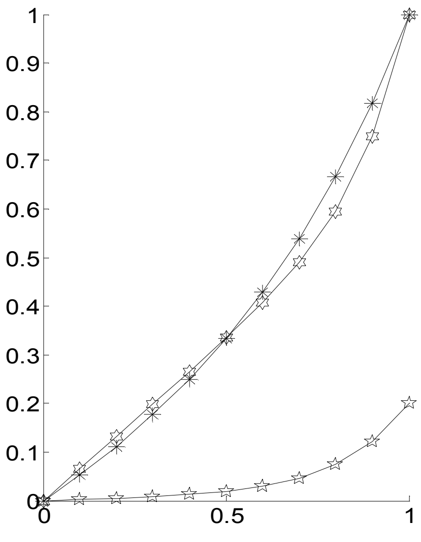

Рис.3

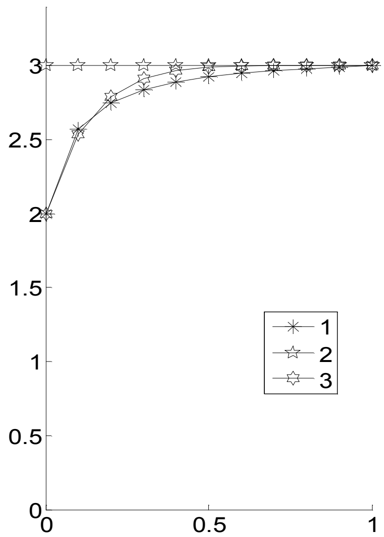

Рис.4

На рис.3, 4 приведены результаты восстановления тех же функций $\psi(\xi), \beta(\xi)$, но начальное приближение функций были равны $\psi_0(\xi) = 0.2\xi/(12-11\xi)$, $\beta(\xi) = 3$. Была получена следующая невязка: $S = 0.01934$. Видно, что имеет место лучшее соответствие точных и восстановленных значений коэффициентов в случае, когда начальное приближение для кинетического коэффициента $\beta(\xi)$ лежит выше истинного значения. Приведенные результаты показывают эффективность предложенного алгоритма решения этой обратной задачи.

Литература.

1. *Венецианов Е.В., Рубинштейн Р.Н.* Динамика сорбции из жидких сред. М.: Наука, 1983.
2. *Горшков В.И., Сафонов М.С., Воскресенский Н.М.* Ионный обмен в противоточных колоннах. М.: Наука, 1981.
3. *Золотарев П.П.* Проблемы теории динамики сорбции и хроматографии в неподвижных слоях//ЖФХ. 1985. Т.59. №6.С. 1342–1351.
4. *Иванов В.А., Николаев Н.П., Горшков В.И.* Способ определения динамических параметров противоточных ионообменных колонн//Теоретические основы химической технологии.1992. Т. 26. №1. С.43-49.
5. *Туйкина С.Р.* О решении некоторых обратных задач динамики сорбции градиентными методами //Вестн. Моск. ун-та. Сер.15, Вычисл. матем. и киберн., 1990, №4, с.33-39.
6. *Tuikina S.R., Solov'eva S.I.* Inverse problems for a mathematical model of redox sorption // Computational Mathematics and Modeling. — 2007. — Vol. 18, N. 1. — P. 10–18.
7. *Tuikina S.R., Solov'eva S.I.* Mathematical modeling numerical determination of coefficients in some mathematical models of nonisothermal sorption dynamics // Computational Mathematics and Modeling. — 2010. — Vol. 21, N. 2. — P. 117–126.
8. *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.
9. *Денисов А.М.* Единственность определения нелинейного коэффициента системы уравнений в частных производных в малом и целом // Докл. РАН, 1994, т. 338, №4, с.444-447.
10. *Denisov A.M., Leshchenko V.A.* Uniqueness theorems for problems of detetminibg the coefficients in nonlinear systems of equations of sorption dynamics. // J.Inv. Ill-Posed Problems, 1994, Vol.2, N. 1, pp. 15-32
11. *Туйкина С.Р.* Определение коэффициентов сорбции решением обратной задачи //Математическое моделирование.1997. Т. 9. №8.С.95-104.
12. *Туйкина С. Р.* Численные методы решения некоторых обратных задач динамики сорбции // Вестник Московского университета. Серия 15: Вычислительная математика и кибернетика. — 1998. — № 4. — С. 16–19.
13. *Tuikina S. R., Solov'eva S. I.* Numerical determination of two characteristics of a compressible ion exchanger // Computational Mathematics and Modeling. — 2004. — Vol. 15, N. 2. — P. 138–149.