

С.Р. Туйкина¹

О ЧИСЛЕННОМ МЕТОДЕ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ДВУХ ХАРАКТЕРИСТИК СОРБЕНТА В СЛУЧАЕ УМЕНЬШЕНИЯ ПОРИСТОСТИ СОРБЕНТА. *

Введение

Для описания сорбционных процессов в колоннах используются математические модели, представляющие собой начально-краевые задачи для квазилинейных систем уравнений в частных производных [1-3]. Коэффициенты этих квазилинейных систем уравнений в частных производных (изотерма сорбции, кинетический коэффициент, коэффициенты диффузии, пористости), описываются функциями, зависящими от концентрации вещества, то есть от функции, являющейся одной из компонент решения задачи для квазилинейной системы уравнений в частных производных. Методы непосредственного измерения этих коэффициентов из химических экспериментов достаточно трудоемки и требуют длительного времени, а в ряде случаев невозможны. Наиболее доступной информацией для непосредственного измерения в сорбционном эксперименте является выходная динамическая кривая, представляющая собой концентрацию вещества в фиксированных точках сорбционной колонны во все моменты времени. Поэтому возникают обратные задачи, состоящие в определении, нелинейных коэффициентов квазилинейной системы уравнений в частных производных, по дополнительной информации о решении начально-краевой задачи, заданной в фиксированной точке пространства во все моменты времени.

В работах [4-7] рассмотрены методы решения некоторых 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 [10-12]. Методы решения некоторых обратных задач определения изотермы или коэффициента пористости в случае сжимаемости ионита и вопросы единственности решения таких обратных задач изучены в работах [13-14].

¹ Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, tuik@cs.msu.ru

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

В данной работе для математической модели, учитывающей внутридиффузионную кинетику и разбухание сорбента, рассмотрена обратная задача определения изотермы сорбции, и коэффициента пористости по двум выходным динамическим кривым. Выходные динамические кривые получены в двух точках в одном эксперименте или на выходе колонны в двух разных экспериментах. Для этой обратной задачи предлагается численный метод решения градиентного типа с использованием техники сопряженных задач, и приводятся результаты вычислительных экспериментов с целью исследования его возможностей.

Постановка обратной задачи

Рассмотрим математическую модель сорбции в случае внутридиффузионной кинетики и разбухания сорбента

$$u_t + \nu u_x + \delta(a)a_t = 0, \quad 0 < x < l, \quad 0 < t \leq T, \quad (1)$$

$$a_t = \beta(\varphi(u) - a), \quad 0 \leq x \leq l, \quad 0 < t \leq T, \quad (2)$$

$$u(0, t) = \mu(t), \quad 0 < t \leq T, \quad (3)$$

$$u(x, 0) = 0, a(x, 0) = 0, \quad 0 \leq x \leq l. \quad (4)$$

Здесь $u(x, t)$, $a(x, t)$ - концентрации сорбируемого вещества в порах сорбента и в сорбенте, $\varphi(u)$ - изотерма сорбции, β - кинетический коэффициент, $\delta(a) = \frac{1 - \varepsilon(a)}{\varepsilon(a)}$, $\varepsilon(a)$ - коэффициент пористости (доля объема колонны, занимаемая раствором), ν - скорость потока, $\mu(t)$ - входная концентрация сорбируемого вещества.

Пусть функции $\varphi(\xi)$, $\delta(\xi)$, $\mu(t)$ удовлетворяют следующим условиям

$$\begin{aligned} \varphi(\xi) \in C^2(-\infty, \infty), \quad \varphi(0) = 0, \quad \varphi(\infty) < C_1, \\ 0 < \varphi'(\xi) \leq C_2, \quad \xi \in (-\infty, \infty) \end{aligned} \quad (5)$$

$$\begin{aligned} \delta(\xi) \in C^1(-\infty, \infty), \quad 0 < C_3 \leq \delta(\xi) \leq C_4, \\ 0 \leq \delta'(\xi) \leq C_5, \quad \xi \in (-\infty, \infty) \end{aligned} \quad (6)$$

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

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

При выполнении этих условий аналогично работам [8, 9] доказываем, что существует единственное решение задачи (1)-(4) $\{u(x, t), a(x, t)\} \in C^1[Q_T]$, $Q_T = \{(x, t), 0 < x < l, 0 < t \leq T\}$ такое, что

$$0 \leq u(x, t) \leq \mu(t), \quad 0 \leq a(x, t) \leq \varphi(\mu(t)),$$

$$u_t(x, t) > 0, \quad a_t(x, t) > 0, \quad a_x(x, t) < 0, \quad 0 \leq x \leq l, \quad 0 < t \leq T.$$

Рассмотрим следующую обратную задачу.

Пусть известны функции $\mu_i(t)$, удовлетворяющие условию (7), параметры ν, β и выходные динамические кривые

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

Требуется определить функции $\varphi(\xi), \delta(\xi), u(x, t), a(x, t)$, удовлетворяющие (1)-(4), (8).

Решением обратной задачи (1)-(4), (8) назовем функции $\varphi(\xi), \delta(\xi), u(x, t), a(x, t)$, удовлетворяющие (1)-(4), (8) такие, что $\varphi(\xi)$ удовлетворяет (5), $\delta(\xi)$ удовлетворяет (6) и $u, a \in C^1[Q_T]$.

Итерационный метод градиентного типа

Предположим, что точное решение допускает такую параметризацию, $\varphi(\xi, \lambda) \in C^2[(-\infty, \infty) \times \Lambda_N]$, $\delta(\xi, z) \in C^2[(-\infty, \infty) \times Z_N]$, и соответствие между λ и $\varphi(\xi, \lambda)$, z и $\delta(\xi, z)$ взаимно однозначно, а Λ_N, Z_N – компакты в R^N . Из условий (5), (6) следует, что $\varphi(\xi, \lambda)$, $\delta(\xi, z)$ являются монотонно возрастающими, положительными функциями.

Тогда задача (1)-(4) определяет непрерывный и взаимно однозначный оператор из $\Lambda_N \times Z_N$ в $L_2[0, T] \times L_2[0, T]$

$$A\{\lambda, z\} = \{\bar{f}_1, \bar{f}_2\}$$

Пусть для функций $\bar{f}_i(t)$, удовлетворяющих условию (8), существуют векторы $\{\bar{\lambda}, \bar{z}\}$, такие что $A\{\bar{\lambda}, \bar{z}\} = \{\bar{f}_1, \bar{f}_2\}$, и они измерены с погрешностью δ , т.е. известны функции $f_{i\delta}(t)$ такие, что

$$\sum_{i=1}^2 \|f_{i\delta}(t) - \bar{f}_i(t)\|_{L_2[0, T]} \leq \delta,$$

Чтобы найти приближенное решение обратной задачи $\varphi(\xi, \lambda_\delta), \delta(\xi, z_\delta), u_\delta(x, t), a_\delta(x, t)$ будем находить минимум функции невязки

$$S(\lambda, z) = \sum_{i=1}^2 \int_0^T (u_i(x_i, t, \lambda, z) - f_{i\delta}(t))^2 dt \text{ на } \Lambda_N \times Z_N \text{ с критерием}$$

$$\sum_{i=1}^2 \|A\{\lambda_\delta, z_\delta\} - f_{i\delta}(t)\|_{L_2[0, T]} \leq \delta, \quad (9)$$

для окончания процесса минимизации.

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

Тогда функции

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

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

являются решениями задачи

$$\Delta u_t + v\Delta u_x + \beta\delta(a, z)(\varphi_u \Delta u + \varphi_\lambda \Delta \lambda - \Delta a) + \beta(\delta_a \Delta a + \delta_z \Delta z)(\varphi(u, \lambda) - a) + R = 0, (x, t) \in Q_T, \quad (10)$$

$$\Delta a_t = \beta(\varphi_u \Delta u + \varphi_\lambda \Delta \lambda - \Delta a) + R = 0, 0 \leq x \leq l, 0 < t \leq T, \quad (11)$$

$$\Delta u(0, t) = 0, 0 < t \leq T, \quad (12)$$

$$\Delta u(x, 0) = 0, \Delta a(x, 0) = 0, 0 \leq x \leq l, \quad (13)$$

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

Функциям $\mu_i(t)$ соответствуют решения

$$u_i(x, t, \lambda, z), a_i(x, t, \lambda, z), i = 1, 2.$$

Приращение невязки равно

$$\begin{aligned} S(\lambda + \Delta \lambda, z + \Delta z) - S(\lambda, z) = \\ = \sum_{i=1}^2 \int_0^T (2(u_i(x_i, t, \lambda, z) - f_{i\delta}(t))\Delta u_i(x_i, t) + (\Delta u_i(x_i, t))^2) dt. \end{aligned}$$

Задачи, сопряженные (10)-(13), имеют вид

$$\alpha_{it} + v\alpha_{ix} + \beta\varphi_u(u_i, \lambda)(\eta_i - \delta(a_i, z)\alpha_i) = 0, (x, t) \in Q_T, \quad (14)$$

$$\eta_{it} = \beta(\eta_i - \delta(a_i, z)\alpha_i) + \beta\delta_a(a_i, z)(\varphi(u_i, \lambda) - a_i)\alpha_i, 0 \leq x \leq l, 0 \leq t < T, \quad (15)$$

$$v\alpha_i(x_i, t) = 2(u_i(x_i, t, \lambda, z) - f_{i\delta}(t)), 0 \leq t < T, \quad (16)$$

$$\alpha_i(x, T) = 0, \eta_i(x, T) = 0, 0 \leq x \leq l. \quad (17)$$

Учитывая (10)- (17), получим

$$I = \sum_{i=1}^2 \int_0^T \int_0^{x_i} \{ \alpha_i(\Delta u_{it} + v\Delta u_{ix} + \beta\delta(a_i, z)(\varphi_u \Delta u_i - \Delta a_i) + \beta\delta_a(a_i, z)\Delta a_i(\varphi(u_i, \lambda) - a_i) +$$

$$+ \eta_i(\Delta a_{it} - \beta(\varphi_u(u_i, \lambda)\Delta u_i - \Delta a_i)) + \Delta u_i(\alpha_{it} + v\alpha_{ix} - \beta\varphi_u(u_i, \lambda)(\delta(a_i, z)\alpha_i - \eta_i)) +$$

$$+ \Delta a_i(\eta_{it} - \beta(\eta_i - \delta(a_i, z)\alpha_i) - \beta\delta_a(a_i, z)(\varphi(u_i, \lambda) - a_i)\alpha_i) \} dx dt =$$

$$= \sum_{i=1}^2 \int_0^T \int_0^{x_i} \{ (\alpha_i \Delta u_i + \eta_i \Delta a_i)_t + (v\Delta u_i \alpha_i)_x \} dx dt.$$

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

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

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

$$I = \sum_{i=1}^2 \int_0^T \int_0^{x_i} \{ \beta\varphi_\lambda \Delta \lambda(\eta_i - \delta(a_i, z)\alpha_i) - \beta\delta_z \Delta z(\varphi(u_i, \lambda) - a_i)\alpha_i + R \} dx dt$$

Тогда приращение функционала невязки имеет вид

$$\Delta S = \sum_{i=1}^2 \int_0^T \int_0^{x_i} \{ \beta \varphi_{\lambda} \Delta \lambda (\eta_i - \delta(a_i, z) \alpha_i) - \beta \delta_z \Delta z (\varphi(u_i, \lambda) - a_i) \alpha_i + \\ + (\Delta u_i(x_i, t))^2 + R \} dx dt$$

Пренебрегая величинами второго порядка малости, получим градиент

$$S_{\lambda_k} = \sum_{i=1}^2 \int_0^T \int_0^{x_i} \beta \varphi_{\lambda_k} (u_i, \lambda) (\eta_i - \delta(a_i, z) \alpha_i) dx dt, 0 \leq k \leq N_1 \\ S_{z_j} = \sum_{i=1}^2 \int_0^T \int_0^{x_i} \{ \beta \delta_{z_j} (a_i - \varphi(u_i, \lambda)) \alpha_i \} dx dt, 0 \leq j \leq N_2.$$

Функции будем искать в виде многочленов Бернштейна

$$\varphi(\xi, \lambda) = \sum_{k=0}^{N_1} \lambda_k C_{N_1}^k \xi^k (1-\xi)^{N_1-k}, \lambda_0 = 0, \lambda_k \leq \lambda_{k+1}, \lambda_{N_1} > 0, \\ \delta(\xi, z) = \sum_{k=0}^{N_2} z_k C_{N_2}^k \xi^k (1-\xi)^{N_2-k}, z_0 = \delta(0), z_k \leq z_{k+1}, z_{N_2} > 0.$$

Так как множества Λ_N, Z_N представляют собой выпуклые многогранники в R^N , вершины которых можно выписать явно, то для минимизации невязки $S(\lambda, z)$ будем использовать метод условного градиента.

Результаты вычислительных экспериментов

Вычислительный эксперимент, позволяющий исследовать возможности предложенного метода, проводился при следующих условиях. Для известных функций $\varphi(\xi), \delta(\xi)$ с заданными входными концентрациями $\mu_i(t)$, решались задачи (1)-(4).

Найденные функции $f_i(t) = u(x_i, t), t \in [0, T], i = 1, 2, x_1 \in (0, l), x_2 = l$ использовались затем в качестве "точных выходных кривых", для моделирования "экспериментальных данных" в них вносилась погрешность $\delta = 0.02$, такая что $\sum_{i=1}^2 \|f_{i\delta}(t) - \bar{f}_i(t)\|_{L_2[0, T]} \leq \delta$. Функции $f_{i\delta}(t)$ использовались как исходная информация для решения обратных задач определения $\varphi(\xi), \delta(\xi)$ методом условного градиента. Входные концентрации равны $\mu_1(t) = 1 - (t - 0.8)^2 / 0.64$ для $t \leq 0.8$ и $\mu_1(t) = 1$ для $t > 0.8$, $\mu_2(t) = 1 - (t - 0.6)^2 / 0.36$ для $t \leq 0.6$ и $\mu_2(t) = 1$ для $t > 0.6$, а параметры были равны: $\beta = 1, \nu = 3, l = 1, T = 1$, число параметров в многочлене Бернштейна равно $N = 8$. Во всех модельных задачах численное решение краевых задач проводилось на пространственно-временной сетке 51×51 узлов методом конечных разностей.

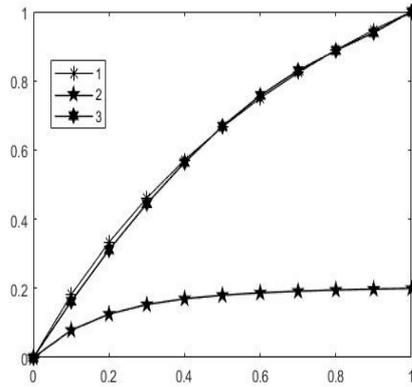


Рис.1

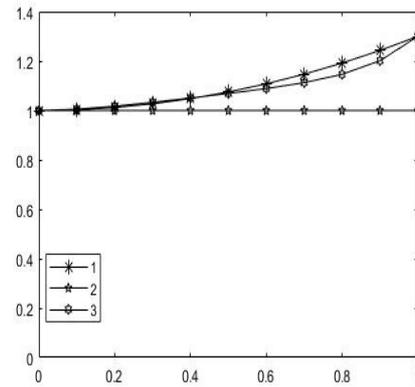


Рис.2

На рис.1 приведены результаты восстановления функции $\varphi(\xi) = 2\xi/(1 + \xi)$. На рис.2 приведены результаты восстановления коэффициента $\delta(\xi) = 1 + 0.3\xi^2$. Начальные приближения имели следующий вид: $\varphi_0(\xi) = 2.4\xi/(12\xi + 1)$, $\delta(\xi) = 1$. Входная концентрация $\mu_2(t) = \mu_1(t)$. Выходные динамические кривые получены в двух точках в одном эксперименте $x_1 = l/2, x_2 = l$.

На всех рисунках цифрой 1 отмечена точная функция, 2 - начальное приближение, 3 - восстановленная функция. Была получена следующая невязка: $S = 0.0061$

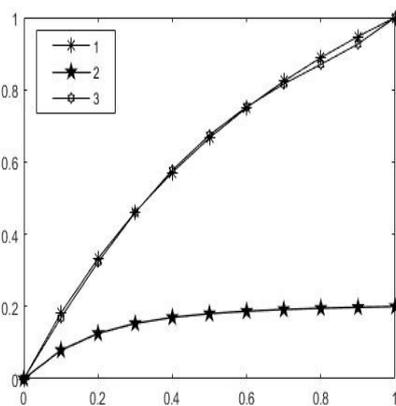


Рис.3

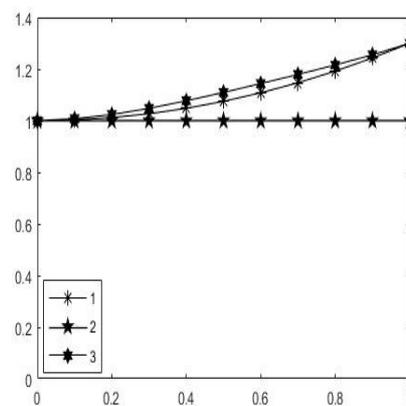


Рис.4

На рис.3, 4 приведены результаты восстановления тех же функций $\varphi(\xi), \delta(\xi)$, при тех же начальных приближениях функций. Выходные динамические кривые получены на выходе колонны в двух разных экспериментах $x_1 = l, x_2 = l$ с разными входными концентрациями $\mu_1(t), \mu_2(t)$. Была получена следующая невязка: $S = 0.00592$.

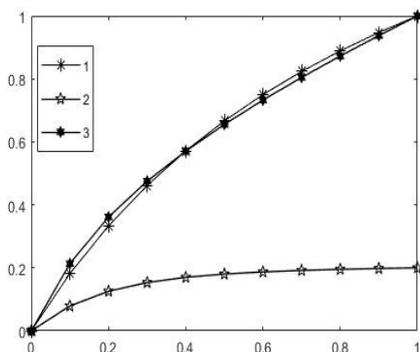


Рис.5

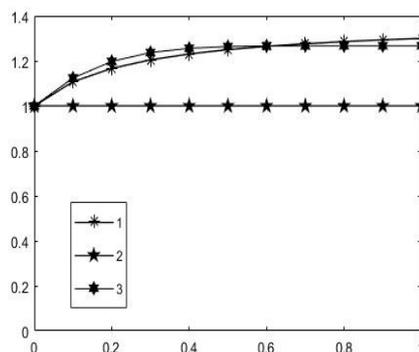


Рис.6

На рис.5 приведены результаты восстановления функции $\varphi(\xi) = 2\xi/(1 + \xi)$. На рис.6 приведены результаты восстановления коэффициента $\delta(\xi) = 1 + 1.5\xi/(1 + 4\xi)$. Начальные приближения имели следующий вид: $\varphi_0(\xi) = 2.4\xi/(12\xi + 1)$, $\delta(\xi) = 1$. Входные концентрация были $\mu_1(t), \mu_2(t)$. Выходные динамические кривые получены на выходе колонны в двух разных экспериментах $x_1 = l, x_2 = l$. Была получена следующая невязка: $S = 0.0059$

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., М.С. Сафонов, Н.М. Воскресенский 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, no. 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, no. 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. *А.М. Денисов.* Единственность определения нелинейного коэффициента системы уравнений в частных производных в малом и целом // Докл. РАН, 1994, т. 338, №4, с.444-447.

10. *А.М. Denisov, V.A. Leshchenko* Uniqueness theorems for problems of determining the coefficients in nonlinear systems of equations of sorption dynamics. // J.Inv. Ill-Posed Problems, 1994, Vol.2, No. 1, pp. 15-32

11. *Туйкина С.Р.* Определение коэффициентов сорбции решением обратной задачи //Математическое моделирование.1997. Т. 9. №8.С.95-104.

12. *Tuikina S. R.* Numerical determination of two sorbent characteristics from dynamic observations // Computational Mathematics and Modeling. — 2018. — Vol. 29, no. 3. — P. 299–306.

13. *Tuikina S. R.* Inverse problems for a mathematical model of ion exchange in a compressible ion exchanger // Computational Mathematics and Modeling. — 2002. — Vol. 13, no. 2. — P. 159–168.

14. *Tuikina S. R., Solov'eva S. I.* Numerical determination of two characteristics of a compressible ion exchanger // Computational Mathematics and Modeling. — 2004. — Vol. 15, no. 2. — P. 138–149.