С.Р. Туйкина[1]

О ЧИСЛЕННОМ МЕТОДЕ РЕШЕНИЯ ДВУХ ОБРАТНЫХ ЗАДАЧ ДЛЯ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ РЕДОКС-СОРБЦИИ.[*]

Введение

В химических технологиях часто используются избирательные сорбенты, к ним относятся, например, редокс-иониты, адсорбционные редокситы. Это материалы способны к обмену ионами, реакциям образования комплексов и окислительно-восстановительным реакциям в контакте с жидкими и газообразными химическими смесями. Для описания сорбционных и ионообменных процессов в колоннах с избирательными сорбентами используются математические модели, представляющие собой начально-краевые задачи для квазилинейных систем уравнений в частных производных [1-5]. Коэффициенты этих квазилинейных систем уравнений в частных производных (изотерма сорбции или ионообмена, кинетический коэффициент, коэффициент скорости окислительно-восстановительной реакции), 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, а в ряде случаев невозможны. Поэтому возникают обратные задачи, состоящие в определении нелинейных коэффициентов квазилинейной системы уравнений в частных производных по выходным динамическим кривым (концентрация вещества в фиксированных точках колонны во все моменты времени).

В работах [6-10] исследуется единственность решения таких обратных задач, методы решения некоторых обратных коэффициентных задач для ряда математических моделей сорбции и иоонообмена рассмотрены, например, в работах [10-16].

В данной работе для математической модели, учитывающей внутридиффузионную кинетику и окислительно-восстановительную реакцию [3-5], рассмотрены обратные задачи определения изотермы сорбции или коэффициента скорости окислительно-восстановительной

---

[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**).

реакции по выходной динамической кривой, полученной на выходе колонны. Для этих обратных задач 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, учитывающую внутридиффузионную кинетику и окислительно-восстановительную реакцию

$$\varepsilon u_t + \nu u_x + a_t + w_t = 0,\ 0 < x \le l,\ 0 < t \le T, \tag{1}$$

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

$$w_t = k(w)a,\ 0 \le x \le l,\ 0 < t \le T, \tag{3}$$

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

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

Здесь $u(x,t), a(x,t), w(x,t)$ - концентрации сорбата- окислителя в растворе, в порах сорбента и прореагировавшего сорбата, $\varphi(\xi)-$ изотерма сорбции, $k(\xi)-$коэффициент скорости окислительно-восстановительной реакции, $\mu(t)$- входная концентрация, ε, ν, γ - это коэффициент пористости, скорость потока и коэффициент внутридиффузионной кинетики.

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

$$\mu(t) \in C^1[0,T],\ \mu(0) = 0,\ \mu'(t) > 0,\ t \in [0,T], \tag{6}$$

$$\varphi(\xi) \in C^1(-\infty,\infty), \varphi(0) = 0, \varphi(\infty) > \mu(T), 0 < \varphi'(\xi) \le C_1, \xi \in (-\infty,\infty), \tag{7}$$

$$\kappa(\xi) \in C^1(-\infty,\infty),\ 0 < k(0) < C_2,\ -C_3 < k'(\xi) \le 0, \text{ или}$$

$$0 < k'(\xi) \le C_4, \xi \in (-\infty,\infty) \tag{8}$$

где $C_i, i = 1,...,4$ - положительные постоянные.

Рассмотрим следующие обратные задачи.

Задача 1. Известны функции $\mu(t), k(\xi)$ и функция

$$f(t) = u(l,t),\ t \in [0,T], \tag{9}$$

определить $\varphi(\xi), u(x,t), a(x,t), w(x,t)$, удовлетворяющие (1)-(5), (9).

Решением обратной задачи (1)-(5), (9) назовем функции $\varphi(\xi), u(x,t), a(x,t)$, удовлетворяющие (1)-(5), (9) такие, что $\varphi(\xi)$ удовлетворяет (7) $u,a,w \in C^1[Q_T]$.

Задача 2. Известны функции $\mu(t), \varphi(\xi)$ и функция $f(t)$, удовлетворяющая (9), определить $k(\xi), u(x,t), a(x,t), w(x,t)$, удовлетворяющие (1)-(5), (9).

Решением обратной задачи (1)-(5), (9) назовем функции $k(\xi), u(x,t), a(x,t)$, удовлетворяющие (1)-(5), (9) такие, что $k(\xi)$ удовлетворяет (8) $u, a, w \in C^1[Q_T]$.

Итерационный метод градиентного типа

Предположим, что точное решение задач 1,2 допускает параметризацию

$$\varphi(\xi,\lambda) \in C^2[(-\infty,\infty)\times\Lambda_N], \qquad k(\xi,d) \in C^2[(-\infty,\infty)\times D_N],$$

где Λ_N, D_N – компакты в R^N, а соответствие между λ и $\varphi(\xi,\lambda)$, d и $k(\xi,d)$ взаимно однозначно. Из условий (7), (8) следует, что $\varphi(\xi,\lambda)$, $k(\xi,d)$ являются монотонными, положительными функциями.

Тогда задача (1)-(4) определяет непрерывные и взаимно однозначные операторы из Λ_N в $L_2[0,T]$ $A_1\lambda = \bar{f}_1$, а из D_N в $L_2[0,T]$ $A_2 d = \bar{f}_2$

Пусть для функций $\bar{f}_i(t)$, удовлетворяющих условию (9), существуют векторы $\bar{\lambda}, \bar{d}$, такие что $A_1\bar{\lambda} = \bar{f}_1, A_2\bar{d} = \bar{f}_2$, и они измерены с погрешностью δ, т.е. известны функции $f_{i\delta}(t)$ такие, что

$$\left\| f_{i\delta}(t) - \bar{f}_i(t) \right\|_{L_2[0,T]} \le \delta,$$

Чтобы найти приближенное решение обратных задач 1, 2 $\varphi(\xi,\lambda_\delta)$, $u_\delta(x,t), a_\delta(x,t)$ или $k(\xi,d_\delta), u_\delta(x,t), a_\delta(x,t)$ будем находить минимум функций невязки $S_1(\lambda) = \int_0^T (u(l,t,\lambda) - f_{1\delta}(t))^2 dt$ на Λ_N $S_2(d) = \int_0^T (u(l,t,d) - f_{2\delta}(t))^2 dt$ на D_N с критериями $\left\| A_1\lambda_\delta - f_{1\delta}(t) \right\|_{L_2[0,T]} \le \delta, \left\| A_2 d_\delta - f_{2\delta}(t) \right\|_{L_2[0,T]} \le \delta,$ для окончания процесса минимизации.

Построим градиент функции невязки для задачи 1 $S(\lambda)$. Пусть вектору λ соответствует решение $u(x,t,\lambda), a(x,t,\lambda)$, а вектору $\lambda + \Delta\lambda$,— $u(x,t,\lambda+\Delta\lambda), a(x,t,\lambda+\Delta\lambda)$

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

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

являются решениями задачи

$$\varepsilon\Delta u_t + \nu\Delta u_x + \gamma(\varphi_u\Delta u + \varphi_\lambda\Delta\lambda - \Delta a) + k(w)\Delta a +$$
$$+ k_w\Delta wa + R = 0, 0< x \le l, 0 < t \le T, \qquad (10)$$
$$\Delta a_t = \gamma(\varphi_u\Delta u + \varphi_\lambda\Delta\lambda - \Delta a) + R_1, 0\le x \le l, 0 < t \le T, \qquad (11)$$
$$\Delta w_t = k(w)\Delta a + k_w\Delta wa + R_2, 0\le x \le l, 0 < t \le T, \qquad (12)$$
$$\Delta u(0,t) = 0,\ 0 < t \le T, \qquad (13)$$
$$\Delta u(x,0) = 0, \Delta a(x,0) = 0,\ \Delta w(x,0) = 0, 0 \le x \le l, \qquad (14)$$

где $R_i = O(\|\Delta\lambda\|^2), R = R_1 + R_2$.

Приращение невязки равно

$$S_1(\lambda+\Delta\lambda) - S_1(\lambda) = \int_0^T (2(u(l,t,\lambda) - f_{1\delta}(t))\Delta u(l,t) + (\Delta u(l,t))^2)dt \quad .$$

Задача, сопряженная (10)-(14), имеет вид

$$\varepsilon\alpha_t + \nu\alpha_x + \gamma\varphi_u(u,\lambda)(\eta - \alpha) = 0,\ 0\le x < l, 0 \le t < T, \qquad (15)$$
$$\eta_t = \gamma(\eta - \alpha) + k(w)(\alpha - \rho)\ , 0\le x \le l, 0 \le t < T, \qquad (16)$$
$$\rho_t = k_w(w)a(\alpha - \rho)\ , 0\le x \le l, 0 \le t < T, \qquad (17)$$
$$\nu\alpha(l,t) = 2(u(l,t,\lambda) - f_{1\delta}(t)),\ \ 0 \le t < T, \qquad (18)$$
$$\alpha(x,T) = 0, \eta(x,T) = 0, \rho(x,T) = 0,\ 0 \le x \le l\,. \qquad (19)$$

Учитывая (10)- (19) , получим

$$I = \int_0^T\int_0^l \{\alpha(\varepsilon\Delta u_t + \nu\Delta u_x + \gamma(\varphi_u\Delta u - \Delta a) + k(w)\Delta a + k_w(w)\Delta wa) +$$
$$+ \eta(\Delta a_t - \gamma(\varphi_u(u,\lambda)\Delta u - \Delta a\ )) + \rho(\Delta w_t - k(w)\Delta a - k_w(w)\Delta wa) +$$
$$+ \Delta u(\varepsilon\alpha_t + \nu\alpha_x - \gamma\varphi_u(u,\lambda)(\alpha - \eta)) +$$
$$+ \Delta a(\eta_t - \gamma(\eta - \alpha) + k(w)(\rho - \alpha)) + \Delta w(\rho_t - k_w(w)a(\alpha - \rho))\}dxdt =$$
$$= \int_0^T\int_0^l \{(\alpha\Delta u + \eta\Delta a + \rho\Delta w)_t + (\nu\Delta u\alpha)_x\}dxdt.$$

Из начальных и граничных условий (13)-(14), (18)-(19) следует, что

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

С другой стороны, из уравнений (10)-(12), (15)-(17) имеем

$$I = \int_0^T\int_0^l \{\gamma\varphi_\lambda\Delta\lambda(\eta - \alpha) + R\}dxdt$$

Тогда приращение функционала невязки имеет вид

$$\Delta S = \int_0^T\int_0^l \{\gamma\varphi_\lambda\Delta\lambda(\eta - \alpha) + (\Delta u(l,t))^2 + R\}dxdt$$

Пренебрегая величинами второго порядка малости, получим градиент

$$S_{1\lambda_k} = \int_0^T\int_0^l \{\gamma\varphi_{\lambda_k}(\eta - \alpha)\}dxdt, 0 \le k \le N_1$$

Аналогично получен градиент невязки для задачи 2

$$S_{2d_j} = \int_0^T \int_0^l \{k_{d_j}(w)(\rho - \alpha) a \, dxdt, 0 \le j \le N_2 .$$

где функции $\alpha, \eta, \rho -$ решения сопряженной задачи

$$\varepsilon\alpha_t + \nu\alpha_x + \gamma\varphi_u(u)(\eta - \alpha) = 0,\ 0 \le x < l, 0 \le t < T,$$
$$\eta_t = \gamma(\eta - \alpha) + k(w,d)(\alpha - \rho)\ , 0 \le x \le l, 0 \le t < T,$$
$$\rho_t = k_w(w,d) a(\alpha - \rho)\ , 0 \le x \le l, 0 \le t < T,$$
$$\nu\alpha(l,t) = 2(u(l,t,d) - f_{2\delta}(t)),\ 0 \le t < T,$$
$$\alpha(x,T) = 0, \eta(x,T) = 0, \rho(x,T) = 0,\ 0 \le x \le l .$$

Функции будем искать в виде многочленов Бернштейна

$$\varphi(\xi,\lambda) = \sum_{k=0}^{N_1} \lambda_k C_{N_1}^k \xi^k (1-\xi)^{N_1-k},\ \lambda_0 = 0, \lambda_k \le \lambda_{k+1}, \lambda_{N_1} > 0,$$
$$k(\xi,d) = \sum_{k=0}^{N_2} d_k C_{N_2}^k \xi^k (1-\xi)^{N_2-k},\ d_0 = \delta(0), d_{N_2} > 0.$$

Так как множества Λ_N, D_N представляют собой выпуклые многогранники в R^N, вершины которых можно выписать явно, то для минимизации невязок $S_1(\lambda), S_2(d)$, будем использовать метод условного градиента.

Результаты вычислительных экспериментов

Вычислительный эксперимент проводился при следующих условиях. Для известных функций $\varphi(\xi), k(\xi), \mu(t)$ решались задачи (1)-(4). Найденные функции $f_i(t) = u(l,t), t \in [0,T], i = 1,2$ использовались затем в качестве "точных выходных кривых", для моделирования "экспериментальных данных" в них вносилась погрешность δ, такая что $\left\| f_{i\delta}(t) - \bar{f}_i(t) \right\|_{L_2[0,T]} \le \delta$. Функции $f_{i\delta}(t)$ использовались как исходная информация для решения обратных задач 1, 2 определения $\varphi(\xi), k(\xi)$ 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: $\gamma = 1, \nu = 3, l = 1, T = 1$, число параметров в многочленах Бернштейна равно N=8. Во всех модельных задачах численное решение краевых задач проводилось на пространственно-временной сетке 51x51 узлов методом конечных разностей.

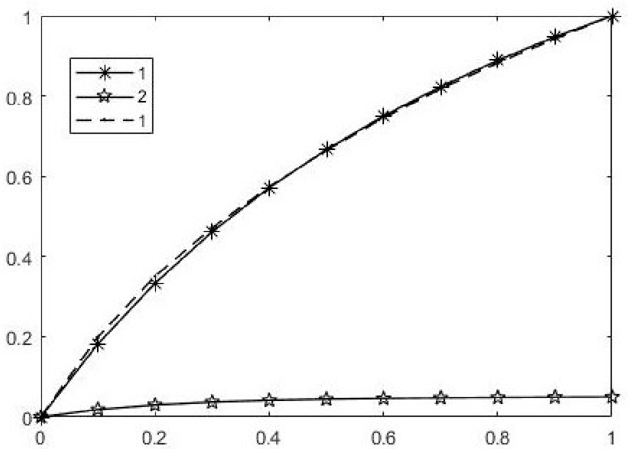

Рис.1

На рис.1 приведены результаты восстановления изотермы $\varphi(\xi) = 2\xi/(1+\xi)$. Начальное приближение имело следующий вид: $\varphi_0(\xi) = 0.5\xi/(10\xi+1)$. Погрешность равна $\delta = 0.05$. Коэффициент скорости окислительно-восстановительной реакции равен $k(\xi) = 1+0.3\xi$, На всех рисунках цифрой 1 отмечена точная функция, 2 - начальное приближение, 3 - восстановленная функция. Была получена следующая невязка: $S = 0.0164$

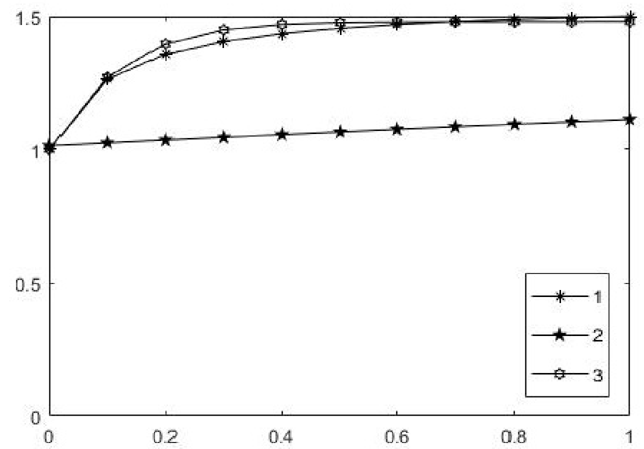

Рис.2

На рис.2 приведены результаты восстановления коэффициента $k(\xi) = 1+5\xi/(1+9\xi)$. Начальное приближение имело следующий вид: $k_0(\xi) = 0.11\xi/(1.1\xi+1)$. Погрешность равна $\delta = 0.02$. Изотерма равна $\varphi(\xi) = 2\xi/(1+\xi)$. Была получена следующая невязка: $S = 0.0054$

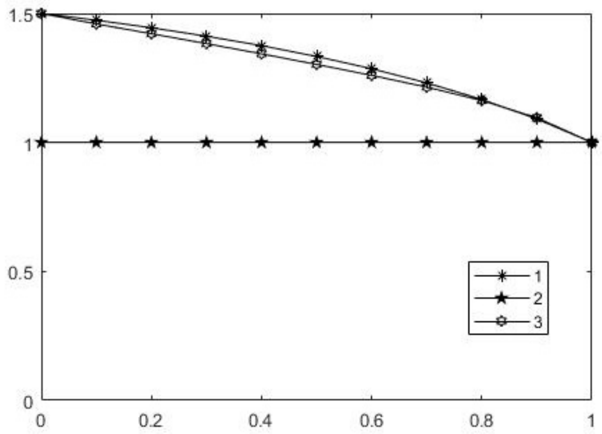

Рис.3

На рис.3 приведены результаты восстановления коэффициента $k(\xi) = 1.5 - 0.5\xi/(2-\xi)$. Начальное приближение имело следующий вид: $k_0(\xi) = 1.5$. Погрешность равна $\delta = 0.02$. Изотерма равна $\varphi(\xi) = 2\xi/(1+\xi)$. Была получена следующая невязка: $S = 0.00641$

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. *Гориков В.И., М.С. Сафонов, Н.М.Воскресенский* Ионный обмен в противоточных колоннах. М.: Наука, 1981.
3. *Кравченко Т.А., Николаев Н.И.* Кинетика и динамика процессов в редокситах. М.: Химия, 1982.
4. *Кафаров В.В.* Методы кибернетики в химии и химической технологии. М.: Химия, 1976.
5. *Коржов Е.Н.* Математическое моделирование процессов редокс-сорбции. Воронеж: Изд. дом ВГУ, 2016.
6. *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.
7. *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.

8. *A.M. 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, P. 15-32.
9. *A. M. Denisov, A. Lorenzi* Recovering an unknown coefficient in an absorption model with diffusion.//J. Inverse and Ill-Posed Problems, 2007, Vol.***15***, No. 6, P. 599–610.
10. *Tuikina S. R.* Inverse problems for a mathematical model of redox-sorption. //Computational Mathematics and Modeling, 2007, Vol. 18, no. 1, P. 10–18.
11. *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.
12. *Tuikina S. R.* Inverse problems for a mathematical model of ion exchange in a compressible ion exchanger с Computational Mathematics and Modeling , 2002, Vol. 13, no. 2. , P. 159–168.
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, no. 2, P. 138–149.
14. *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.
15. *Tuikina S. R.* Numerical determination of two sorbent characteristics from dynamic observations.//Computational Mathematics and Modeling. — 2018, Vol. 29, no. 3, P. 299–306.
16. *Tuikina S. R.* A numerical method for determining two sorbent characteristics in case of decreasing porosity.//Computational Mathematics and Modeling, 2019, Vol. 30, no. 2, P. 155–163.