С.Р. Туйкина, С.И. Соловьева

О ЧИСЛЕННОМ РЕШЕНИИ ОДНОЙ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ ДЛЯ ДВУХМЕРНОЙ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ДИНАМИКИ СОРБЦИИ [1]

В газовой хроматографии достаточно часто используются сорбционные колонны большого диаметра. Для математического моделирования сорбционных процессов в них необходимо использовать двух- и трехмерные математические модели. При математическом моделировании процессов распространения загрязнения в грунтовых водах также возникает необходимость исследования двух- и трехмерных математических моделей сорбции и диффузии. В данной работе рассматривается математическая модель сорбции, учитывающая внутридиффузионную кинетику, продольную и поперечную диффузию [1, 2]. Для этой математической модели изучена обратная задача определения изотермы сорбции по экспериментальной выходной динамической кривой, предложены устойчивые методы решения обратной и прямой задач. Обратные задачи в случае одномерных математических моделей динамики сорбции рассмотрены, например, в работах [3]-[5].

1. Двумерная математическая модель сорбции.

Рассмотрим математическую модель сорбции, учитывающую внутридиффузионную кинетику, продольную и поперечную диффузию**.**

$$\varepsilon u_t + a_t + \nu u_x = D_L u_{xx} + D_T u_{yy}, \quad (x, y, t) \in Q_T, \tag{1}$$

$$a_t = \beta(\varphi(u) - a), \quad 0 \le x \le L, 0 < y < B, 0 < t \le T, \tag{2}$$

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

$$\lambda u_x(L, y, t) + u(L, y, t) = 0, \quad 0 \le y \le B, \ 0 < t \le T, \tag{4}$$

$$D_T u_y(x, 0, t) = 0, D_T u_y(x, B, t) = 0, \quad 0 < x < L, \ 0 < t \le T, \tag{5}$$

$$u(x, y, 0) = 0, \quad a(x, y, 0) = 0, \quad 0 \le x \le L, \ 0 \le y \le B. \tag{6}$$

Здесь $u(x, y, t)$, $a(x, y, t)$ – концентрации сорбата в растворе и в порах сорбента, $\varphi(\xi)$ – изотерме сорбции, ν – это скорость потока, ε – пористость сорбента, $\mu(y,t)$ – входная концентрация, β, D_L, D_T – коэффи-

[1] Работа выполнена при поддержке Российского Фонда Фундаментальных Исследований (код проекта 08–01–0314)

циенты внутридиффузионной кинетики, продольной и поперечной диффузии, $Q_T = \{(x, y, t), 0 < x < L, 0 < y < B, 0 < t \le T\}$.

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

$$\mu(y,t) \in C^{0,1}[0,B]\times[0,T], \quad \mu(y,0) = 0,\ \mu_t(y,t) > 0,\ \ y \in [0,B], t \in [0,T], \quad (7)$$

$$\varphi(\xi) \in C^2(-\infty,\infty), \quad \varphi(0) = 0,\ 0 < \varphi'(\xi) \le C_1,\ \xi \in (-\infty,\infty), \quad (8)$$

где C_1 – положительная постоянная.

Рассмотрим следующую обратную задачу. Известны функция $\mu(y,t)$, константы $\beta, D_L, D_T, \nu, \varepsilon$ и функция (экспериментальная выходная динамическая кривая)

$$f(y,t) = u\ (L, y, t),\ y \in [0,B], t \in [0,T], \quad (9)$$

определить $\varphi(\xi), u(x,y,t), a(x,y,t)$, удовлетворяющие (1)–(6), (9).
Решением обратной задачи (1)–(6), (9) назовем функции $\varphi(\xi), u(x,y,t)$, $a(x,y,t)$ удовлетворяющие (1)–(6), (8),(9) такие, что $u, a \in C^{2,1}[Q_T]$.

2. Численный метод решения обратной задачи.

Рассмотрим численный метод решения обратной задачи, основанный на дескриптивной регуляризации с градиентным методом. Будем дополнительно предполагать, что $\varphi(\xi,\lambda) \in C^{1,1}[M]$, $M = (-\infty,\infty)\times\Lambda_N$, Λ_N –компакт в R^N. Пусть дополнительная информация $f(y,t)$ задана с погрешностью δ, т.е. известны функции $f_\delta(t)$ такие, что $\|f_\delta(t) - f(t)\|_{L_2[0,T]} \le \delta.$

Будем минимизировать невязку

$$S(\lambda) = \int_0^B\int_0^T (u(L,y,t,\lambda) - f_\delta(y,t))^2\,dtdy$$

методом условного градиента с критерием $S(\lambda) \le \delta^2$ для окончания процесса минимизации.

Здесь $u(x,y,t,\lambda)$ компонента решения краевой задачи (1)-(6), соответствующая $\varphi(\xi,\lambda)$.

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

Тогда функции

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

являются решениями задачи

$$\varepsilon\Delta u_t + \nu\Delta u_x - D_L\Delta u_{xx} - D_T\Delta u_{yy} + \beta(\varphi_u\Delta u + \varphi_\lambda\Delta\lambda + R - \Delta a) = 0, \quad (10)$$
$(x, y, t) \in Q_T$,
$$\Delta a_t = \beta(\varphi_u\Delta u + \varphi_\lambda\Delta\lambda + R - \Delta a), \quad 0 \le x \le L, 0 < y < B, 0 < t \le T, \quad (11)$$
$$\Delta u(0, y, t) = 0, \quad 0 \le y \le B, \ 0 < t \le T, \quad (12)$$
$$\lambda\Delta u_x(L, y, t) + \Delta u(L, y, t) = 0, \quad 0 \le y \le B, \ 0 < t \le T, \quad (13)$$
$$D_T\Delta u_y(x, 0, t) = 0, \quad D_T\Delta u_y(x, B, t) = 0, \quad 0 < x < L, \ 0 < t \le T, \quad (14)$$
$$\Delta u(x, y, 0) = 0, \quad \Delta a(x, y, 0) = 0, \quad 0 \le x \le L, \ 0 \le y \le B, \quad (15)$$
где $R = O(\|\Delta\lambda\|^2)$.

Приращение невязки равно
$$S(\lambda + \Delta\lambda) - S(\lambda) = \int_0^B\int_0^T (2(u(L, y, t, \lambda) - f_\delta(y, t))\Delta u(L, y, t) + (\Delta u(L, y, t))^2)dtdy.$$
Представим приращение невязки в более удобном виде. Рассмотрим задачу, сопряженную к (10)-(15)
$$\varepsilon\alpha_t + \nu\alpha_x + D_L\alpha_{xx} + D_T\alpha_{yy} + \beta\varphi_u(\eta - \alpha) = 0, \quad (x, y, t) \in Q_T, \quad (16)$$
$$\eta_t = \beta(\eta - \alpha), \quad 0 \le x \le L, 0 < y < B, 0 \le t < T, \quad (17)$$
$$\alpha(0, y, t) = 0, \quad \eta(0, y, t) = 0, \ 0 \le t < \tau, \quad (18)$$
$$D_L\alpha_x(L, y, t) + (\nu + D_L/\lambda)\alpha(L, y, t) = 2(u(L, y, t) - f_\delta(y, t)),$$
$$0 \le y \le B, 0 \le t < T, \quad (19)$$
$$D_T\alpha_y(x, 0, t) = 0, \quad D_T\alpha_y(x, B, t) = 0, \quad 0 < x < L, 0 \le t < T, \quad (20)$$
$$\alpha(x, y, T) = 0, \quad \eta(x, y, T) = 0, \ 0 \le x \le L, \ 0 \le y \le B. \quad (21)$$
Учитывая (16) - (21) , получим
$$I = \int_0^T\int_0^B\int_0^L \{\alpha(\varepsilon\Delta u_t + \nu\Delta u_x - D_L\Delta u_{xx} - D_T\Delta u_{yy} + \beta(\varphi_u\Delta u - \Delta a)) +$$
$$+ \eta(\Delta a_t - \beta(\varphi_u\Delta u - \Delta a)) + \Delta u(\varepsilon\alpha_t + \nu\alpha_x + D_L\alpha_{xx} + D_T\alpha_{yy} +$$
$$+ \beta\varphi_u(\eta - \alpha) + \Delta a(\eta_t - \beta(\eta - \alpha))\}dxdydt =$$
$$= \int_0^T\int_0^B\int_0^L \{(\varepsilon\alpha\Delta u + \eta\Delta a)_t + (\nu\Delta u\alpha + D_L\Delta u\alpha_x - D_L\Delta u_x\alpha)_x +$$
$$+ (D_T\Delta u\alpha_y - D_T\Delta u_y a)_y\}dxdydt.$$

Из начальных и граничных условий (12)-(15), (18)-(21) следует, что
$$I = \int_0^T\int_0^B (2(u(L, y, t, \lambda) - f_\delta(y, t))\Delta u(L, y, t)dydt.$$
С другой стороны, из уравнений (10)-(11), (16)-(17) имеем

$$I = \int_0^T \int_0^B \int_0^L \beta \varphi_\lambda \Delta\lambda (\eta - \Delta\alpha)\, dxdydt\,.$$

Тогда приращение функционала невязки имеет вид

$$\Delta S = \int_0^L \int_0^B \int_0^T (\beta(\varphi_\lambda \Delta\lambda + R)(\eta - \alpha) + (\Delta u(L, y, t))^2 / l) dtdydx\,.$$

Пренебрегая величинами второго порядка малости, получим градиент

$$S_{\lambda_i} = \int_0^L \int_0^B \int_0^T \beta \varphi_\lambda (\eta - \alpha) dtdydx, \quad 0 \le i \le N\,. \tag{22}$$

Изотерму будем искать в виде многочленов Бернштейна

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

Нетрудно проверить, что соответствие между λ и $\varphi(\xi, \lambda)$ взаимно однозначно.

3. Численные методы решения прямой и обратной задачи.

Для численного решения прямой задачи (1) – (6) используем разностную схему переменных направлений (продольно - поперечная схема) [6]. В прямоугольнике $G = \{(x, y), 0 \le x \le L, 0 \le y \le B\}$ построим равномерную сетку ω_h с шагами $h_x = \dfrac{L}{N_x}, h_y = \dfrac{B}{N_y}$. Сеточную аппроксимацию функции $u(x_i, y_j, t_n)$ назовем v_{ij}^n, а функции $a(x_i, y_j, t_n)$ — w_{ij}^n. Переход от слоя n к слою $n+1$ совершается в два этапа с шагами $0{,}5\tau$. Далее будем использовать следующие обозначения для сеточных функций v_{ij}^n и w_{ij}^n: $v_{ij} = v_{ij}^n$, $w_{ij} = w_{ij}^n$, $\hat{v}_{ij} = v_{ij}^{n+1}$, $\hat{w}_{ij} = w_{ij}^{n+1}$, а так же и промежуточные значения $\bar{v}_{ij} = v_{ij}^{n+\frac{1}{2}}$, $\bar{w}_{ij} = w_{ij}^{n+\frac{1}{2}}$, которые рассматриваются как значения v, w при $t = t_n + \dfrac{\tau}{2}, \tau = \dfrac{T}{N_t}$.

На первом этапе решается задача для $\bar{v}_{ij}$ и $\bar{w}_{ij}$

$$\varepsilon \frac{\bar{v}_{ij} - v_{ij}}{0.5\tau} + \beta(\varphi(v_{ij}) - w_{ij}) + \frac{\nu(v_{i+1j} - v_{ij})}{h_x} = \tag{23}$$

$$= D_L \frac{v_{i-1j} - 2v_{ij} + v_{i+1j}}{h_x^2} + D_T \frac{\bar{v}_{ij-1} - 2\bar{v}_{ij} + \bar{v}_{ij+1}}{h_y^2} \qquad 1 < i < N_x, 1 < j < N_y\,,$$

$$\frac{\overline{w}_{ij} - w_{ij}}{0.5\tau} = \beta(\varphi(v_{ij}) - \overline{w}_{ij}), \quad 1 \le i \le N_x, 1 \le j \le N_y, \tag{24}$$

с граничными и начальными условиями

$$\overline{v}_{i1} = \overline{v}_{i2}, \quad \overline{v}_{iN_y} = \overline{v}_{iN_y-1}, \qquad v_{ij}^0 = w_{ij}^0 = 0, \quad 1 \le i \le N_x, 1 \le j \le N_y. \tag{25}$$

Уравнение (23) можно решить методом прогонки по второй переменной . На втором этапе решаем задачу

$$\varepsilon\frac{\hat{v}_{ij} - \overline{v}_{ij}}{0.5\tau} + \beta(\varphi(\overline{v}_{ij}) - \hat{w}_{ij}) + \frac{\nu(\hat{v}_{i+1j} - \hat{v}_{ij})}{h_x} = \tag{26}$$

$$= D_L\frac{\hat{v}_{i-1j} - 2\hat{v}_{ij} + \hat{v}_{i+1j}}{h_x^2} + D_T\frac{\overline{v}_{ij-1} - 2\overline{v}_{ij} + \overline{v}_{ij+1}}{h_y^2}, \qquad 1 < i < N_x, 1 < j < N_y,$$

$$\frac{\hat{w}_{ij} - \overline{w}_{ij}}{0.5\tau} = \beta(\varphi(\overline{v}_{ij}) - \hat{w}_{ij}), \qquad 1 \le i \le N_x, \quad 1 \le j \le N_y \tag{27}$$

с граничными условиями

$$\hat{v}_{1j} = \mu(y_j, t_{j+1/2}), \quad \hat{v}_{N_x-1j} = \hat{v}_{N_xj}(1 + \frac{h_x}{\lambda}), \qquad 1 \le j \le N_y. \tag{28}$$

И находим v_{ij}^n и w_{ij}^n. Уравнение (26) теперь решается вдоль первой переменной.

Для численного решения обратной задачи (1)–(6), (9) аналогично прямой строились разностные уравнения, сеточные аппроксимации граничных и начальных условий для сопряженной задачи (16) - (21) и для изотермы $\varphi(\xi, \lambda)$ определялись функции $\alpha(x, y, t)$ и $\eta(x, y, t)$. Неизвестные коэффициенты Бернштейна определялись из условия минимума функционала (22).

4. Численный эксперимент.

Для известных функций $\mu(t), \varphi(\xi)$ решалась задача (1)–(6) и определялась функция $f(t) = u(L, y, t)$. Затем строилась выходная динамическая кривая $f_\delta(t) = f\ (t) + \varepsilon\,\alpha(t)$, где $\alpha(t)$ случайная величина, равномерно распределенная на $[-1,1]$, ε – погрешность эксперимента. Функции $f_\delta(t)$ использовались как исходная информация для решения обратной задачи предложенным методом. Численный эксперимент проводился для функций $\mu(y,t) = \dfrac{t}{t+1}$, $\varphi_{test\,1}(u) = \dfrac{2u}{1+u}$, $\varphi_{test\,2}(u) = \dfrac{6u}{1+5u}$ и параметров $\beta = 1$,

$D_L = 0.1, D_T = 1, N_x = 200,\ N_y = 10, N_t = 100, L = 100, B = 1, T = 100,\ \lambda = 1.$

На рис. 1 представлены результаты численного решения прямой задачи (1)-(6) методом конечных разностей. Графики даны для функции $u(x, y, t)$ при $0 < x < 150, 0 < t \le 100$ в точке $y = 0{,}5$ при $\varphi_{test}(u) = \dfrac{2u}{1+u}$.

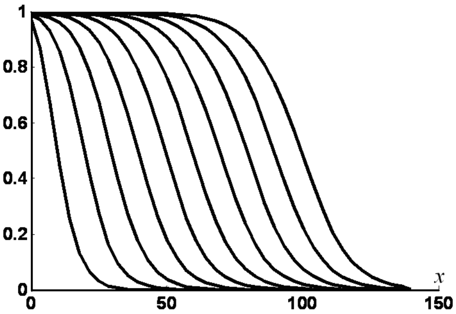

рис.1

На рис. 2, 4 представлены выходные кривые $f_\delta(t)$ с $\varepsilon = 0{,}01$ и $\varepsilon = 0{,}05$ соответственно. На рис. 3, 5 – результаты восстановления функции $\varphi_{test}(u) = \dfrac{2u}{1+u}$ градиентным методом, соответствующие этим выходным кривым. В первом случае $\mathrm{S} = 0.0036581$, во втором $S = 0.07575$.

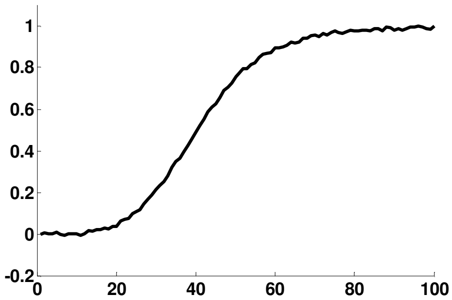

рис.2

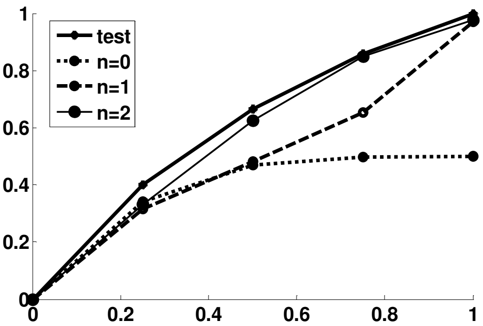

рис.3

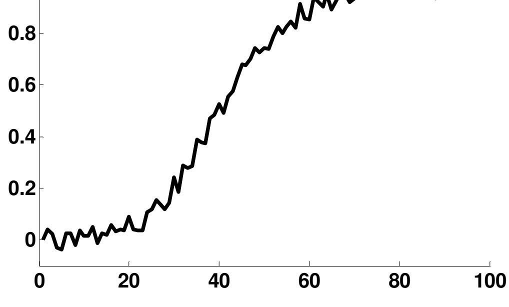

рис.4

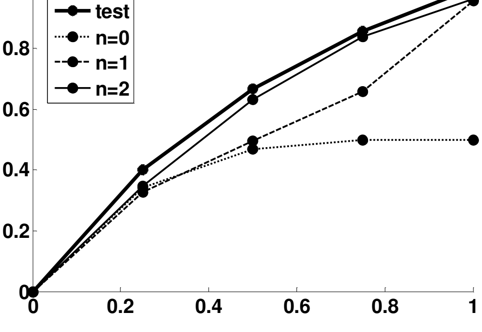

рис.5

На рис. 6 выходная кривая $f_\delta(t)$ с $\varepsilon = 0{,}1$ и на рис.7 первые три итерации восстановления функции $\varphi_{test}(u) = \dfrac{6u}{1+5u}$. Здесь $S = 0{,}0998$.

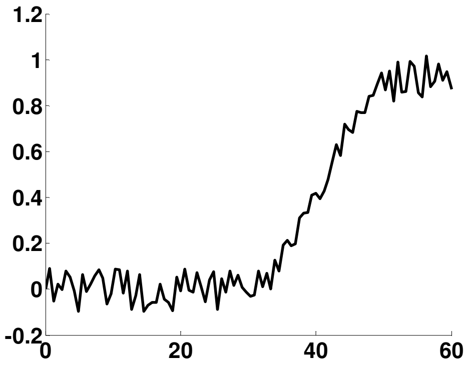

рис.6

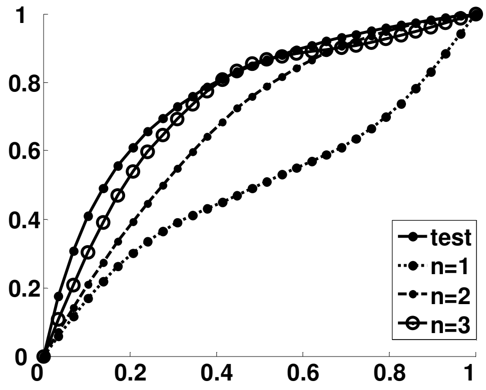

рис.7

Приведенные результаты показывают эффективность предложенного алгоритма решения этой обратной задачи.

Литература.

1. Золотарев П.П. Проблемы теории динамики сорбции и хроматографии в неподвижных слоях//ЖФХ. 1985. Т.59. №6.С. 1342–1351.
2. A.Buikis, Z.Rusakevich, N. Ulanova Modelling of the convective diffusion process with nonlinear sorption in multi-layered aquifer//Transport in Porous Media.1995. V.19. P.1-13
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. Туйкина С.Р., Соловьева С.И. О численном определении коэффициентов некоторых математических моделей неизотермической динамики сорбции// Прикладная математика и информатика. №33.М.:МАКС Пресс. 2009.С.5-12
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. А.А. Самарский Теория разностных схем. Москва: Наука. 1983. С.616.