

УДК 533.539

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ ЗАДАЧИ, ВОЗНИКАЮЩИЕ ПРИ СОЗДАНИИ «ЭКОЛОГИЧЕСКОГО ПОЛИЦЕЙСКОГО»

Н. А. Тихонов, М. К. Трубецков, Г. Н. Медведев

(кафедра математики; НИВЦ)

На основе численных методов изучаются возможности интегрально-сорбционного метода контроля присутствия загрязняющих веществ в сточных водах с помощью прибора «экологический полицейский». Рассмотрены как простейшая линейная модель процесса, так и модель ионообменной сорбции, которая позволяет исследовать динамику сорбции в условиях, близких к реальным, когда компоненты раствора сорбируются не независимым путем, а влияют друг на друга.

Прибор «экологический полицейский» состоит из колонки, заполненной сорбентом. В течение заданного промежутка времени, например месяца, через сорбционную колонку непрерывно проходит небольшая часть стока реки, в котором концентрация вещества является функцией времени. В результате сорбции в колонке образуется некоторое распределение вещества по слою сорбента — длине колонки, которое определенным образом соответствует концентрации этого вещества в потоке. После завершения работы колонки сорбент вынимается и химико-аналитическими методами устанавливается распределение вещества по длине колонки как функция координаты. Это распределение является экспериментальной информацией, по которой требуется восстановить зависимость концентрации вещества в потоке на входе в колонку как функцию времени.

1. Линейная модель

Постановка задачи. Пусть c и a — концентрации вещества в растворе и сорбенте. В качестве первого шага рассмотрим задачу в рамках следующей простейшей линейной модели:

$$vc_x + a_\tau = 0, \quad a_\tau = \beta \left(c - \frac{a}{\Gamma} \right), \quad a|_{\tau=0} = 0, \\ c|_{x=0} = c^{\text{gr}}(\tau).$$

Здесь v — скорость пропускания стоков через единицу площади сечения сорбента, x — координата, τ — время. Первое уравнение — это уравнение переноса вещества. В реальных физических задачах $c \ll a$, поэтому мы пренебрегаем слагаемым c_τ . Второе уравнение — это уравнение кинетики сорбции.

В равновесии концентрация $a = \Gamma c$, где Γ — так называемый коэффициент Генри. Когда равновесие нарушено, то поток в зерно пропорционален разности $c - (a/\Gamma)$, β — кинетический коэффициент.

Пусть процесс сорбции происходил при $0 \leq \tau \leq \tau_0$. Затем сорбент анализируют и определяют распределение $a_0(x, \tau_0)$ вещества в сорбенте по длине колонки в момент τ_0 окончания работы. Рассматриваемая задача состоит в определении $c^{\text{gr}}(\tau)$ — концентрации вещества в потоке на границе колонки

(ее входе) как функции времени по экспериментальной информации — снятой с сорбционной колонки функции $a_0(x, \tau_0)$.

Перейдем к безразмерным переменным

$$z = x\beta/v, \quad t = \tau\beta/\Gamma, \quad L = x_0\beta/v, \quad T = \tau_0\beta/\Gamma$$

и обозначим $u(t) = c^{\text{gr}}(t\Gamma/\beta)\Gamma$, $y(z) = a_0(zv/\beta, T\Gamma/\beta)$, $C = c\Gamma$. Получаем задачу:

$$a_t + C_z = 0, \quad a_t = C - a, \quad a|_{t=0} = 0, \quad C|_{z=0} = u(t). \quad (1)$$

В новых обозначениях $u(t)$ — искомая зависимость концентрации вещества в потоке от безразмерного времени t , а $y(z)$ — входная информация (распределение $a(z, T)$ вещества по длине колонки в момент T окончания работы).

Таким образом, задача (1) решается как обратная.

Решение задачи (1) хорошо известно, функции $u(t)$ и $y(z)$ связаны уравнением Фредгольма I рода:

$$\int_0^T K(z, t)u(t)dt = y(z). \quad (2)$$

В уравнении (2) T — полное время сорбции, ядро K имеет вид

$$K(z, t) = e^{-z-T+t} I_0 \left(2\sqrt{z(T-t)} \right),$$

где I_0 — функция Инфельда.

В результате измерений на сорбционной колонке вместо точной функции y определяется с некоторой погрешностью δ функция y_δ , удовлетворяющая условию $\|y - y_\delta\|_{L_2[0, L]} \leq \delta$.

Задача обработки данных наблюдений заключается в восстановлении приближенного вида $u(t)$ по заданной зависимости $y_\delta(z)$ и погрешности δ .

Известно, что такая задача некорректна. Для ее решения необходимо применять регуляризующие алгоритмы. Известный алгоритм состоит в минимизации сглаживающего функционала и выборе параметра регуляризации по невязке.

На рис. 1 прямоугольниками показана функция, подлежащая восстановлению и описывающая залповые сбросы, а штрих-пунктирной кривой — решение

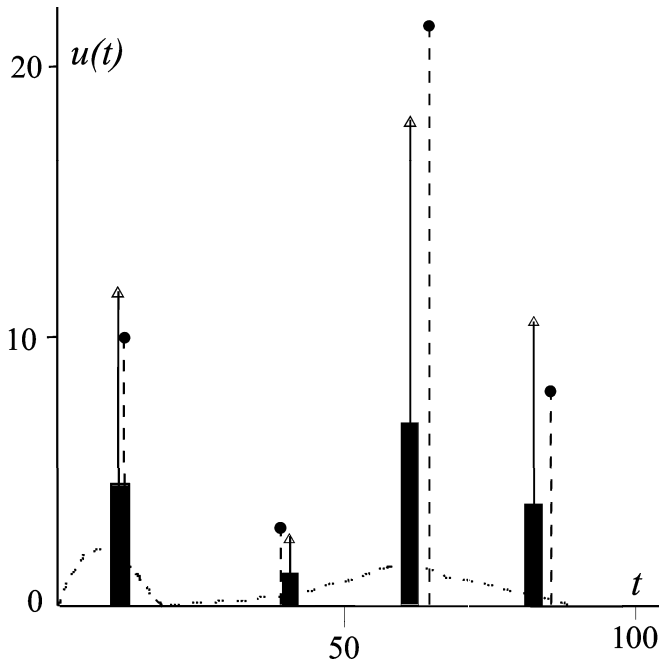


Рис. 1

в классе гладких функций, найденное методом регуляризации при относительной погрешности $\delta = 5\%$. Видно, что точность восстановления $y(t)$ явно недостаточная, и требуется использовать априорную информацию о характере $y(t)$.

Использование дополнительной информации.

На практике сбросы сточных вод имеют часто залповый характер и, следовательно, описываются быстро меняющейся функцией $u(t)$.

Располагая такой априорной информацией о залповом кратковременном характере сбросов, будем искать $u(t)$ в виде

$$u(t) = \bar{u} + \sum_{i=1}^N q_i \delta(t - t_i), \quad (3)$$

где N — число залповых сбросов, \bar{u} — постоянная, характеризующая фоновый уровень сбросов за время наблюдения, δ — дельта-функция Дирака. Все неизвестные в (3) можно считать ограниченными: $0 \leq \bar{u} \leq \bar{u}_{\max}$, $0 \leq q_i \leq q_{\max}$, а \bar{u}_{\max} и q_{\max} определяются технологическими условиями.

Зафиксируем некоторое N в (3). Тогда множество допустимых значений параметров $\mathbf{p}_N = \{\bar{u}, q_i, t_i\}$ образует компакт в пространстве размерности $2N + 1$, и задача после такой параметризации входит в класс корректности.

Для определения вектора параметров \mathbf{p} введем функционал невязки

$$\varphi[\mathbf{p}] = \|y(z) - y_\delta(z)\|_{L_2[0,L]}^2 \quad (4)$$

и рассмотрим следующую вариационную задачу:

$$\mathbf{p}^* = \arg \inf \varphi[\mathbf{p}]. \quad (5)$$

Минимизация функционала. Для минимизации функционала φ можно использовать метод Нью-

тона. Подставляя (3) в (2), имеем:

$$\begin{aligned} y(z) &= \int_0^T K(z, t) u(t) dt = \\ &= \bar{u} \int_0^T K(z, t) dt + \sum_{i=1}^N q_i K_i(z, t_i). \end{aligned}$$

Используем квадратурные формулы для вычисления интеграла в правой части последнего соотношения и согласованные с ними по точности квадратурные формулы выражения для φ . Из этих выражений легко определяется градиент φ и матрица вторых производных φ по параметрам \mathbf{p} , что позволяет применить метод Ньютона минимизации функционала φ . Таким образом, находим вектор параметров \mathbf{p}_N , соответствующий N сбросам.

Если необходимая точность не достигнута, т. е. $\varphi[\mathbf{p}_N] > \delta^2$, то число N увеличиваем на 1. Так поступаем, пока окажется выполненным критерий невязки $\varphi[\mathbf{p}_N^*] \leq \delta^2$. Это условие определяет выбор количества сбросов N и вектор \mathbf{p}_N^* параметров этих сбросов.

Функционал (4), к сожалению, не является выпуклым, и задача (5), вообще говоря, является многоэкстремальной задачей нелинейного программирования. Для ее решения важно использовать алгоритмы, которые позволяют достаточно быстро находить локальные минимумы. Это дает возможность, используя серии различных начальных приближений \mathbf{p}^0 вектора параметров, находить глобальный минимум в задаче (5).

Увеличение числа сбросов и определение их параметров экономичнее проводить с использованием метода игольчатых вариаций, состоящего в следующем.

Функционал φ имеет вид

$$\varphi = \|Au - y_\delta\|_{L_2[0,L]}^2, \quad (6)$$

где A — линейный интегральный оператор. Рассмотрим φ как функционал от u . Пусть u — текущая аппроксимация решения, а δu — некоторая, не обязательно малая, вариация функции u . Соответственно приращение функционала φ будет

$$\Delta\varphi = \varphi[u + \delta u] - \varphi[u] = 2(\delta u, A^*(Au - y_\delta)) + \|A\delta u\|^2. \quad (7)$$

Отсюда первая и вторая вариации равны:

$$\delta\varphi = 2(\delta u, A^*(Au - y_\delta)), \quad \delta^2\varphi = \|A\delta u\|^2.$$

Заметим, что (6) — квадратичный функционал, поэтому соотношение (7) точное и предположения о малости δu не требуют.

Рассмотрим следующий класс δu : $\delta u = q\delta(t - \tau)$. Для таких δu выражение (7), с учетом (2), приво-

дится к виду

$$\Delta\varphi(\tau) = 2q \int_0^L K(z, \tau) \times \left[\int_0^T K(z, t)u(t)dt - y_\delta(z) \right] dz + q^2 \int_0^L K^2 dz. \quad (8)$$

Физический смысл выражения (8) очевиден. Оно описывает величину приращения целевого функционала φ , если предположить наличие дополнительного сброса с мощностью q в момент τ .

Алгоритм минимизации функционала φ построим следующим образом. Пусть имеется некоторое значение N и начальный вектор параметров \mathbf{p}_N^0 . Проведем минимизацию по \mathbf{p} и получим точку \mathbf{p}_N локального минимума функционала φ . В этой точке \mathbf{p}_N рассмотрим линейную часть $\delta\varphi$ приращения $\Delta\varphi$, определяемую первым интегралом в правой части (8). Найдем глобальный минимум функции $\delta\varphi(\tau)$ на отрезке $[0, T]$. Пусть он имеет место в точке $\tau = \tau_{\min}$. Если $\delta\varphi(\tau_{\min}) > 0$, то значение N увеличить нельзя: метод прерывается.

Пусть $\delta\varphi(\tau_{\min}) < 0$. Рассмотрим выражение (8) при $\tau = \tau_{\min}$. Оно имеет вид $\Delta\varphi = aq + bq^2$, где коэффициенты a и b легко вычисляются. Согласно сделанному предположению, $a < 0$. Из (8) видно, что $b > 0$. Поэтому можно найти оптимальное значение мощности q , отвечающее максимальному уменьшению целевого функционала:

$$q_{\text{opt}} = -a/(2b).$$

Таким образом увеличиваем размерность пространства параметров до $2(N + 1) + 1$, включая еще один сброс с параметрами $q_{N+1} = q_{\text{opt}}$, $\tau_{N+1} = \tau_{\min}$, и принимаем вектор $\mathbf{p}_{N+1}^0 = \{\mathbf{p}_N, q_{N+1}, \tau_{N+1}\}$ за новый начальный вектор параметров. Далее процесс повторяется: минимизация и т. д.

Теперь возможны два критерия прерывания. Либо $a > 0$, что говорит о невозможности уменьшения целевого функционала введением дополнительного сброса, либо выполняется критерий остановки по невязке.

Таким образом, мы находимся в классе иерархических (в смысле повышения сложности) моделей. Критерий невязки обеспечивает регуляризирующие свойства предлагаемого метода. Использование игольчатых вариаций экономично с точки зрения количества вычислений. Это объясняется существенным выигрышем за счет выбора начального приближения вектора параметров \mathbf{p}_{N+1}^0 при увеличении количества сбросов. При игольчатых вариациях параметры нового сброса вводятся не произвольно, а так, чтобы сразу получилось хорошее приближение к оптимальному значению вектора \mathbf{p}_{N+1} для случая $N + 1$ сброса.

Пример расчетов. Рассмотренные выше алгоритмы предполагали, что известно непрерывное распре-

деление конечного состояния $y(z)$ сорбированного вещества вдоль слоя сорбента. На практике распределение вещества по колонке снимается в виде ступенчатой функции, представляющей средние количества вещества в нескольких порциях-слоях вдоль колонки.

Рассмотрим следующий вычислительный эксперимент.

Зададим решение u в виде набора стробов на фоне некоторого постоянного уровня \bar{u} :

$$u(t) = \bar{u} + \sum_{i=1}^N q_i \Delta(t, t_i, \varepsilon), \quad (9)$$

где N — число стробов, Δ — ступенька полуширины ε :

$$\Delta(t, t_i, \varepsilon) = \begin{cases} 0, & \text{при } |t - t_i| > \varepsilon, \\ 1, & \text{при } |t - t_i| < \varepsilon. \end{cases}$$

На рис. 1 вертикальные стрелки — это интенсивности сбросов (площади прямоугольников), т. е. «амплитуды» q_i δ -функций, подлежащих восстановлению.

Для функции $u(t)$ вычисляется правая часть (2), которая после этого возмущается случайным образом с некоторой относительной ошибкой. Полученные погрешность δ и функция $y_\delta(z)$, снятая с колонки в виде набора 10 ступенек, принимаются в качестве «экспериментальной» информации. Функция $y_\delta(z)$ приведена на рис. 2.

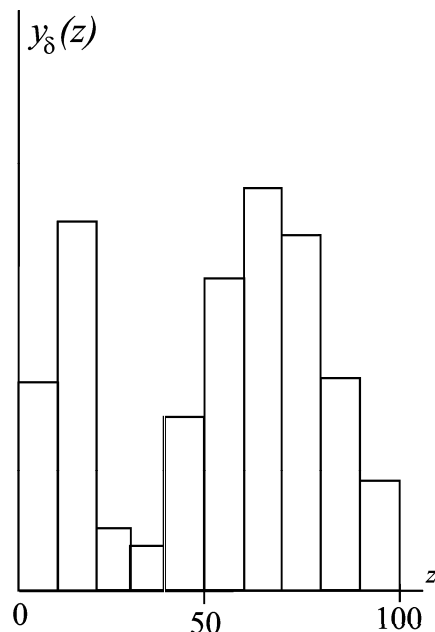


Рис. 2

На рис. 1 приведены также результаты восстановления функции $u(t)$, соответствующей четырем сбросам и относительной погрешности в определении $y_\delta(z)$, равной 10%. «Амплитуды» восстановленных δ -функций отмечены кружками.

Видно, что результат неплохой. По данным рис. 2 восстановить на глаз, что было именно 4 импульса, их примерную величину и положение без математической обработки информации невозможно.

2. Модель ионообменной сорбции

Постановка задачи. В реальности на сорбенте происходит сорбция не только интересующего нас загрязняющего компонента, но также и других компонентов. Причем эти компоненты сорбируются не независимым путем, а влияют друг на друга. Для сорбентов характерен так называемый ионный обмен.

Остановимся подробнее на физике явления. Ионообменный сорбент (ионит) представляет собой гранулы химического вещества, содержащего функциональные группы со свободной химической связью. На каждой группе есть некомпенсированный электрический заряд, на который из раствора садятся ионы определенного знака. При этом ионы обмениваются зарядами так, чтобы заряд функциональной группы, входящий в сорбент, был все время нейтрализован.

В опытах, обработка данных которых будет описана далее, в качестве загрязняющего вещества была выбрана медь, а концентрации других компонентов стока соответствуют реальным параметрам реки Москвы. Для определенности и удобства терминологии будем называть конкретные химические элементы.

Медь в растворе присутствует в форме ионов Cu^{++} . Поэтому для сорбции меди применяют катионит — ионит, на котором сорбируются положительные ионы. В воде это в первую очередь Na^+ , Mg^{++} , Ca^{++} и K^+ . Все это макрокомпоненты, концентрация которых намного превышает концентрацию микрокомпонента Cu^{++} .

В состоянии равновесия между раствором и сорбентом концентрации растворенных веществ и сорбированной части находятся в некотором соотношении, определяемом законом действующих масс:

$$K_i \left(\frac{c_i}{a_i^p} \right)^{1/n_i} = K_j \left(\frac{c_j}{a_j^p} \right)^{1/n_j} \quad (i, j = 1, \dots, N). \quad (10)$$

Здесь индексы i и j соответствуют различным катионам, c_i — концентрации в растворе, a_i^p — концентрации в сорбенте, равновесные раствору, K_i — коэффициенты ионного обмена, которые считаются константами, n_i — заряды ионов.

Кроме этого закона выполнено соотношение

$$\sum_i^N n_i a_i = a_\Sigma = \text{const}, \quad (11)$$

выражающее постоянство заряда, осевшего на заряженные центры в сорбенте.

Таким образом, получаем модель, включающую уравнения ионного обмена (10), (11), а также уравнения переноса, уравнение кинетики сорбции (концентрация сорбированной фазы a_i стремится к равновесной с раствором концентрации a_i^p), начальные и граничные условия. Всего 15 уравнений для определения 15 функций: c_i, a_i, a_i^p :

$$(c_i + a_i)_t + v c_{ix} = 0,$$

$$a_{it} = \beta_i (a_i^p - a_i), \quad K_i \left(\frac{c_i}{a_i^p} \right)^{1/n_i} = K_j \left(\frac{c_j}{a_j^p} \right)^{1/n_j},$$

$$\sum_i^5 n_i a_i = a_\Sigma, \quad i, j = \overline{1, 5} \quad (\text{Na, Ca, Mg, K, Cu}),$$

$$a_i|_{t=0} = a_i^0, \quad c_i|_{t=0} = c_i^0, \quad c_i|_{x=0} = c_i^{\text{gr}}(t). \quad (12)$$

В системе (12) возможны следующие упрощения. В силу того что Cu — микрокомпонент, в законе действующих масс можно пренебречь влиянием Cu на остальные компоненты. Влияние же макрокомпонентов на Cu существенно. Кроме того, в уравнении переноса можно пренебречь c_t по сравнению с a_t ввиду условия $c \ll a$.

В результате задача (12) расщепляется на две части. Первая часть — задача для макрокомпонентов включает в себя уравнения и условия (10)–(12) для $i, j = \overline{1, 4}$ (Na, Ca, Mg, K).

В этой задаче параметры известны, функции $c_i^{\text{gr}}(t)$ — наблюдаемые плавно меняющиеся концентрации макрокомпонентов в изучаемом стоке. Эта задача решается как прямая. При этом вычисляется вспомогательная функция $\gamma(x, t)$ для всех x и t из условия $K_i \left(\frac{c_i}{a_i^p} \right)^{1/n_i} = \frac{K_{\text{Cu}}}{\gamma^{1/2}(x, t)}$.

После этого получаем вторую часть задачи (12) — задачу для концентрации Cu :

$$a_t + v c_x = 0,$$

$$a_t = \beta(c\gamma(x, t) - a), \quad (13)$$

$$a|_{t=0} = 0, \quad c|_{x=0} = u(t).$$

Задача (13) линейна, но с переменным коэффициентом $\gamma(x, t)$, поэтому в отличие от задачи, рассмотренной в п. 1, аналитического решения не имеет.

Путем перехода к безразмерным переменным аналогично п. 1 можно привести системы (12) и (13) к виду, где $\nu = \beta = 1$. Для времени и координаты оставим обозначения t и x .

Пусть процесс сорбции происходил при $0 \leq t \leq T$. Затем сорбент анализируют и для Cu экспериментально определяют на колонке распределение $a(x, T)$. Эту функцию принимают за входную информацию $y(x)$. Задача заключается в том, чтобы по заданному распределению $y(x)$ восстановить функцию $u(t)$. Таким образом, задача (13) решается как обратная.

Отметим, что в случае, когда концентрации макрокомпонентов на входе в колонку постоянны и начальные условия в колонке приведены в равновесие с этими концентрациями, задача (13) сводится к задаче, рассмотренной в п. 1. Таким образом, в п. 1 была рассмотрена простейшая, но, к сожалению, трудно реализуемая на практике ситуация.

Решение обратной задачи. Искомая функция $u(t)$ является управляющей функцией процесса. Задача отыскания $u(t)$ заключается в минимизации функционала

$$I[u] = \int_0^L (a(x, T) - y(x))^2 dx,$$

где $a(x, T)$ зависит от $u(t)$ и определяется решением задачи (13).

Заметим, что задача (13) допускает решения $c(x, t)$, имеющие разрывы вдоль характеристик. Функции $a(x, t)$ при этом непрерывны. Поэтому $u(t)$ будем считать принадлежащей классу кусочно-непрерывных функций.

Пусть имеется априорная информация о том, что решение u имеет вид набора стробов на фоне известного постоянного уровня \bar{u} , то есть принадлежит классу функций вида (9).

Фиксируем некоторое N (например, $N = 1$ или некоторое минимальное число исходя из визуального изучения информации $y(x)$).

Можно действовать двумя путями. Первый путь — непосредственно минимизировать I по параметрам. Рассматриваем функцию u вида (9) как функцию $2N$ параметров $\mathbf{p} = \{\bar{u}, q_i, t_i\}$ (\bar{u} считаем известным). Имея некоторое текущее приближение вектора параметров \mathbf{p} , варьируем по очереди параметры, каждый раз решаем задачу (13) и рассчитываем соответствующее значение вариации $\delta I = \int_0^L 2(a - y)\delta a dx$ функционала I . Рассчитав $\partial I / \partial p$, делаем следующий шаг минимизации одним из известных методов. Если условия $\|a - y\| < \delta$ достичь не удастся, то число стробов увеличивается на 1 и т. д. до получения необходимой точности.

Второй путь — искать производные I по параметрам, используя решение сопряженной задачи [2]. Пусть имеется некоторое текущее приближение $u_n(t)$. По нему, решая (13) как прямую задачу, находим $a(x, T)$. Если u получает приращение δu , не обязательно малое, то в соответствии с (13) функции a и c получают приращения δa и δc . В силу (13) имеем

$$\delta c_x + \gamma \delta c - \delta a = 0, \quad \delta a_t + \delta a - \gamma \delta c = 0.$$

Вариация функционала I имеет вид $\delta I = \int_0^L 2(a - y)\delta a dx$. Тогда для любых дифференци-

руемых функций φ и ψ верно тождество

$$\begin{aligned} \delta I &= \delta I + \int_0^T \int_0^L \psi(\delta c_x + \gamma \delta c - \delta a) dx dt + \\ &+ \int_0^T \int_0^L \varphi(\delta a_t - \gamma \delta c + \delta a) dx dt = \int_0^L H \delta a|_{t=T} dx + \\ &+ \int_0^T \int_0^L \{\delta c(-\psi_x + \gamma \varphi - \gamma \psi) + \delta a(-\varphi_t + \varphi - \psi)\} dx dt + \\ &+ \int_0^T \psi \delta c|_0^L dt + \int_0^L \varphi \delta a|_0^T dx. \end{aligned} \quad (14)$$

Выбираем φ и ψ удовлетворяющими уравнениям и условиям сопряженной задачи:

$$\begin{aligned} \psi_x &= \gamma(\psi - \varphi), \\ \varphi_t &= \varphi - \psi, \\ \psi|_{x=L} &= 0, \quad \varphi|_{t=T} = -(a - y). \end{aligned} \quad (15)$$

Задача (15) решается в области $[0, L] \times [0, T]$ в «обратную сторону»: начальные и граничные условия заданы при $t = T$ и $x = L$, решение ищется при $t < T$ и $x < L$.

Из (14) и (15) находим, что

$$\delta I = - \int_0^T \psi(0, t) \delta u(t) dt, \quad \text{где } \delta u(t) = \delta c|_{x=0}, \quad (16)$$

где непрерывная функция $\psi(0, t)$ уже известна.

Далее, согласно (9), учитываем допустимый вид δu :

$$\begin{aligned} \delta u &= \sum_{i=1}^N \left(\delta q_i \Delta(t, t_i, \varepsilon) + \right. \\ &+ q_i \left[\Delta(t, t_i + \varepsilon + dt/2, dt/2) - \right. \\ &\left. \left. - \Delta(t, t_i - \varepsilon + dt/2, dt/2) \right] \right). \end{aligned}$$

Наконец, из (16) получаем:

$$\begin{aligned} \frac{\partial I}{\partial q_i} &= - \int_{t_i - \varepsilon}^{t_i + \varepsilon} \psi(0, t) dt, \\ \frac{\partial I}{\partial t_i} &= -q_i(\psi(t_i + \varepsilon) - \psi(t_i - \varepsilon)). \end{aligned} \quad (17)$$

Таким образом, имея приближение $u_n(t)$ или, иными словами, текущий набор параметров \mathbf{p} , один раз решив сопряженную задачу (13), находим производные I сразу по всем параметрам. Это позволяет сделать следующий шаг минимизации.

Процесс последовательных приближений заканчивается при достижении точности $\|a - y\| < \delta$. В противном случае, если приближения сходятся,

а точность не достигается, то число стробов N увеличивается на 1. Из (17) видно, что наиболее эффективно помещать новый строб в точку t , в которой $\psi(0, t)$ имеет наибольшее значение. Решение сопряженной задачи позволяет сразу получить хорошее приближение при переходе к $N + 1$ стробу.

Результаты обработки данных лабораторных исследований. Лабораторные исследования проводились в ГЕОХИ им. Вернадского под руководством Р. Х. Хамизова.

На основе экспериментальных данных проведено решение обратной задачи. Пример полученных результатов приведен на рис. 3. В виде прямоугольников приведены импульсы концентрации меди, заданные экспериментально на входе в колонку, а штриховыми линиями с кружками — результаты восстановления этих импульсов по экспериментальной информации $y(x)$. Результаты совершенно не удовлетворительные.

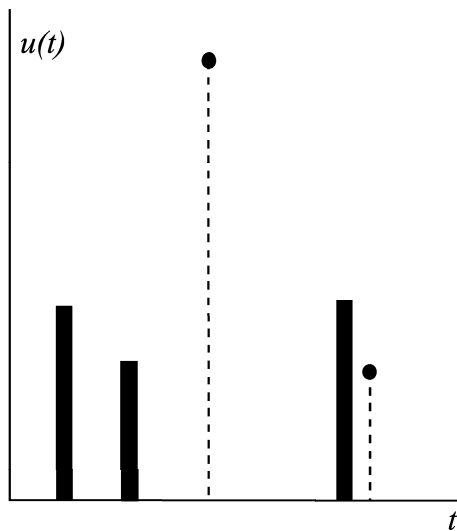


Рис. 3

Для выявления причины этого было проведено изучение прямой задачи с реальными значениями параметров на основе математического моделирования. Было установлено, что при подаче на границу импульса Cu , его скорость продвижения больше скорости переноса Ca и меньше, чем Na . Это приводит к тому, что все импульсы Cu , возникшие на некоторой начальной стадии процесса, собираются вместе в виде одного пика, отмеченного на рис. 4 пунктиром, на движущемся фронте резкого изменения концентраций макрокомпонентов. Поэтому при решении обратной задачи нет возможности различить слившиеся импульсы. Для того чтобы устранить это явление — «яму», в которую собираются импульсы Cu , нами было предложено на стадии подготовки колонки обогащать ее определенным количеством Ca . При этом удалось добиться того, что скорость распространения Ca по сорбенту возрастает и стробы меди распространяются по колонке медленнее, чем передвигается «яма» между Ca и Na . В результате удалось устранить указанный неприятный эффект.

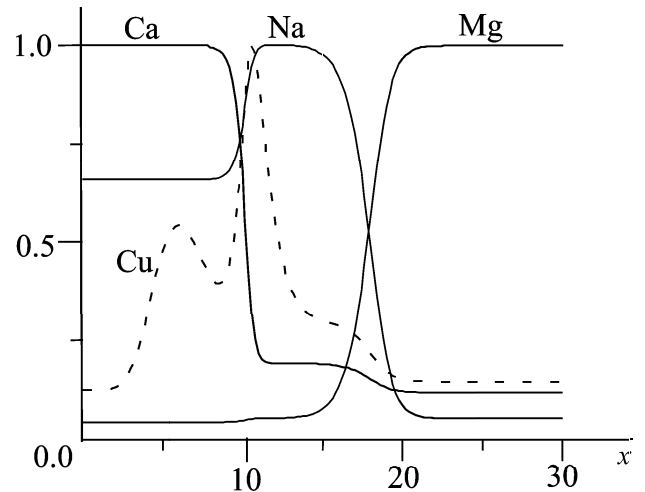


Рис. 4

После этого задача восстановления $u(t)$ по $y(x)$ стала приемлемой для решения. На рис. 5 в качестве примера приведены результаты обработки данных лабораторных измерений. В процессе пропускания

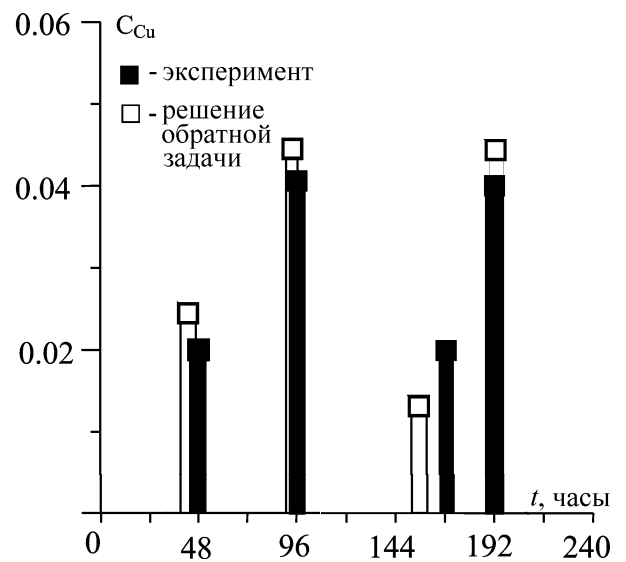


Рис. 5

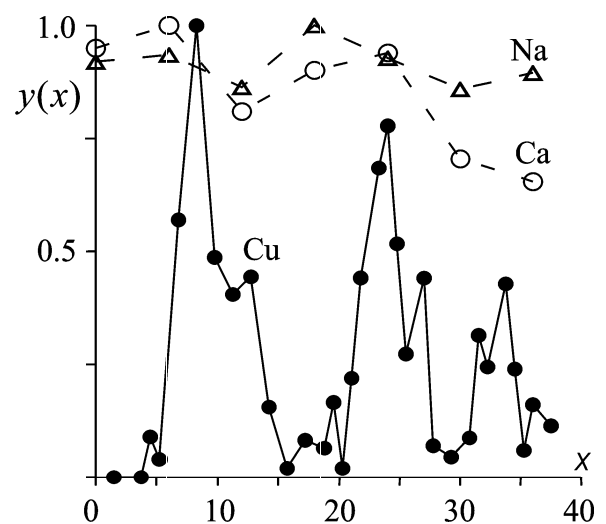


Рис. 6

раствора через колонку задавались четыре импульса концентрации меди, показанные на рис. 5 черными прямоугольниками. После окончания процесса сорбции в результате анализа состава колонки было получено распределение $y(x) = a_{Cu}(x, T)/a_{max}$, приведенное на рис. 6. Относительная среднеквадратичная ошибка в определении $y(x)$ оценивается в 25%. По этому распределению путем решения обратной задачи рассмотренным выше методом были восстановлены импульсы концентрации меди в виде белых прямоугольников на рис. 5.

Таким образом, в настоящее время удается решать поставленную задачу, по крайней мере для

данных, полученных в лабораторных условиях, приближенных к реальным.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант 03-01-00680).

Литература

1. Тихонов Н.А., Трубецков М.К., Медведев Г.Н. // Математическое моделирование. 1997. **9**, № 7. С. 36.
2. Васильев Ф.П. Методы решения экстремальных задач. М., 1981.

Поступила в редакцию
29.09.03