УДК 514.86

ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ ИДЕНТИФИКАЦИИ ИЗОТЕРМЫ СОРБЦИИ

Широкова О.А.
Казанский национальный исследовательский технологический университет

Аннотация. *Рассмотрена обратная задача идентификации изотермы сорбции вещества при фильтрации примеси в пористой среде. Приближенное решение поставленной задачи связано с минимизацией функции невязки. Предложены алгоритмы численного решения прямой и вспомогательных краевых задач.*

Ключевые слова: *минимизация, коэффициенты чувствительности, идентификация, изотерма сорбции, численное решение.*

Исследуется процесс загрязнения подземных вод. При этом необходимо решить обратную задачу идентификации изотермы сорбции одного вещества при фильтрации примеси в пористой среде.

В статье [1] предложено приближенное решение поставленной задачи идентификации изотермы сорбции, связанное с минимизацией функции невязки [2, 3, 4]:

$$I(A,n)=\int_0^T [c(A,n,t)-y(t)]^2\,dt\,, \tag{1.1}$$

на решениях прямой краевой задачи для функции концентрации примеси $c(x,t)$ в области Ω ($0\le x\le 1,\ 0\le t<T$):

$$(1+n\cdot A\cdot c^{n-1})\frac{\partial c}{\partial t}+U\frac{\partial c}{\partial x}=0. \qquad 0\le x\le 1,\ 0\le t<T\,, \tag{1.2}$$

Начальное условие по t:

$$c(x,0)=0\,, \tag{1.3}$$

Граничное условие по x:

$$c(0,t)=1. \tag{1.4}$$

Задача идентификации изотермы сорбции заключается в том, чтобы зная функцию концентрации на правом конце сорбционной колонки c(l,t)=y(t), где y(t) – замеренная величина, полученная опытным путем, восстановить функцию изотермы сорбции $f(c)$.

Нужно найти параметры *A* ($A=\frac{\Gamma}{m}$) и *n* из условия минимума функции *I(A,n)* двух переменных и восстановить функцию изотермы сорбции $f(c)=\Gamma\cdot c^n$. Успешное решение этой задачи зависит от степени выпуклости функции *I(A,n)* двух переменных. Условно единственное решение возможно для сильновыпуклой функции.

Входящая в (1.1) функция y(t) есть замеренная величина, взятая из эксперимента. Таким образом, экспериментально замеренная концентрация примеси y(t) на границе x=1 моделируется как случайное отклонение от величины вычисленного при решении прямой задачи (1.2)-(1.4) значения функции концентрации *c(A,n,t).*

Условия минимума функции (1.1) [5]:

$$\frac{\partial I}{\partial A}=0\,;\qquad \frac{\partial I}{\partial n}=0.$$

Имеем

$$\begin{cases} \dfrac{\partial I}{\partial A} = 2\int\limits_0^T [c(A,n,t) - y(t)] \dfrac{\partial c}{\partial A}(A,n,t)dt\,, \\ \\ \dfrac{\partial I}{\partial n} = 2\int\limits_0^T [c(A,n,t) - y(t)] \dfrac{\partial c}{\partial n}(A,n,t)dt\,, \end{cases} \tag{1.5}$$

где $\dfrac{\partial c}{\partial A}, \dfrac{\partial c}{\partial n}$ – коэффициенты чувствительности.

Обозначим их

$$W1 = \frac{\partial c}{\partial A}[A,n,t], \tag{1.6}$$

$$W2 = \frac{\partial c}{\partial n}[A,n,t], \tag{1.7}$$

и поставим для этих величин две вспомогательные задачи [1].

Для W1 имеем краевую задачу в Ω ($0 \le x \le 1,\ \ 0 \le t < T$):

$$\begin{gathered} (1 + nAC^{n-1})\frac{\partial W1}{\partial t} + U\frac{\partial W1}{\partial t} + nA(n-1)c^{n-2}W1\frac{\partial c}{\partial t} + \\ + nC^{n-1}\frac{\partial c}{\partial t} = 0, \\ W1(x,0) = 0, \quad W1(0,t) = 0\,, \end{gathered} \tag{1.8}$$

Для W2 имеем краевую задачу в Ω ($0 \le x \le 1,\ \ 0 \le t < T$):

$$\begin{gathered} Ac^{n-1}\frac{\partial c}{\partial t} + nAc^{n-1}Lnc\mathrm{W2}\frac{\partial c}{\partial t} + (1 + nAc^{n-1})\frac{\partial}{\partial t}\mathrm{W2} + \\ + U\frac{\partial}{\partial x}\mathrm{W2} = 0, \\ W2(x,0) = 0, \quad W2(0,t) = 0\,, \end{gathered} \tag{1.9}$$

При вычислении функционалов (1.5) необходимо использовать решение прямой задачи (1.2)-(1.4) и решения вспомогательных задач (1.8) и (1.9).

Алгоритм решения задачи идентификации изотермы сорбции включает следующие шаги [1,5]:

– Задаём начальные значения A_0 и n_0.

– Решаем прямую задачу (1.2)-(1.4). Получаем в области Ω – матрицу значений – $c(A_0,n_0,x,t)$, а также вектор значений на границе $x = 1$: $c(A_0,n_0,1,t)$.

– Вычисляем в области Ω поля $\dfrac{\partial c}{\partial t}(A_0,n_0,x,t)$, $(1 + n_0A_0c^{n_0-1})$, $\left(n_0A_0\left(n_0-1\right)c^{n_0-2}\dfrac{\partial c}{\partial t}\right)$, $\left(n_0c^{n_0-1}\dfrac{\partial c}{\partial t}\right)$, $\left(n_0A_0c^{n_0-1}\ln c\dfrac{\partial c}{\partial t}\right)$, $\left(A_0c^{n_0-1}\dfrac{\partial c}{\partial t}\right)$. Отсюда получаем коэффициенты для уравнений (1.8) и (1.9) вспомогательных задач для W1 и W2.

– Решаем вспомогательные задачи (1.8) и (1.9) для определения коэффициентов чувствительности W1 и W2.

– Вычисляем $\frac{\partial \mathrm{I}}{\partial \mathrm{A}}, \frac{\partial \mathrm{I}}{\partial n}$.

– Из условий минимума $\min I(A,n)$: $\frac{\partial I}{\partial A}=0$; $\frac{\partial I}{\partial n}=0$. получаем искомые значения $A=\frac{\Gamma}{m}$ и n. Восстанавливаем функцию $f(c)=\Gamma\cdot c^n$.

Описание постановки и алгоритма численного решения прямой краевой задачи

Пусть изотерма сорбции $C=f(c)=\Gamma\cdot c^n$, где Г и n – параметры изотермы. Численно решим прямую краевую задачу (1.2)-(1.4).

Поскольку функция концентрации колеблется в пределах от 0 до 1, то можно осреднить коэффициент при $\frac{\partial c}{\partial t}$, проинтегрировав его по с от 0 до 1.

$$\int_0^1 (1+nAc^{n-1})dc = c\,|_0^{\,1} + nA(\frac{c^n}{n})\,|^1{}_0 = 1+A.$$

После такого осреднения коэффициента краевая задача (1.2)-(1.4) примет вид

$$(1+A)\frac{\partial c}{\partial t}+U\frac{\partial c}{\partial x}=0; \qquad (1.10)$$

$$c(x,0)=0,\quad c(0,t)=c_0(t). \qquad (1.11)$$

Требуется найти решение задачи в прямоугольнике R=$\{0\le x\le 1,\ 0\le t\le T\}$.

Перейдем к дискретному аналогу задачи (1.10)-(1.11)

Простейшая разностная схема для решения данной задачи следующая. Рассматриваем сетку точек $(ih,j\tau)$, где $i=0,1\ldots,n_h$, $j=0,1\ldots n_\tau$, $\tau=T/n_\tau$ – шаг по оси Ot, $h=1/n_h$ – шаг по оси Ox. (T будем) подбирать сами, с учетом физического смысла задачи: $T>>L$).

Узлы, лежащие на прямых x=0, x=1, t=0, t=T будем считать граничными, остальные – внутренними.

Для узлов, лежащих на границе t=0 из краевых условий задачи можно записать:

$$C_{i,0}=0,\quad (i=\overline{0,n_h+1}).$$

Для граничных узлов, лежащих на прямой x=0 следует условие:

$$C_{0,j}=0,\quad (j=\overline{0,n_\tau+1}).$$

В итоге разностная аппроксимация частных производных имеет вид:

$$\frac{\partial c}{\partial t}\approx\frac{C_{i-1,j}-C_{i-1,j-1}}{\tau};\qquad \frac{\partial c}{\partial x}\approx\frac{C_{i,j}-C_{j-1,j}}{h}.$$

Подставив полученные выражения для $\frac{\partial c}{\partial t}$ и $\frac{\partial c}{\partial x}$ в уравнение (1.10) получим следующую разностную схему:

$$\frac{1+A}{\tau}(C_{i-1,j}-C_{i-1,j-1})+\frac{U}{h}(C_{i,j}-C_{i-1,j}),$$

выразим из нее $C_{i,j}$:

$$C_{i,j}=C_{i-1,j}-\frac{h}{U\tau}(1+A)(C_{i,j}-C_{i-1,j-1}).$$

Для итерационного метода Зейделя запишем разностную схему в явном виде

$$C^{k}{}_{i,j}=C^{k}{}_{i-1,j}-\frac{h}{U\tau}(1+A)(C^{k-1}{}_{i,j}-C^{k-1}{}_{i-1,j-1}) \qquad (1.12)$$

где k – номер текущего итерационного слоя, к-1 – номер предыдущего итерационного слоя.

В явной схеме (3.3) для устойчивости необходимо накладывать жесткие ограничения на сетку. В частности, соотношение шагов h и τ должны удовлетворять условию

$$\frac{h}{\tau}\le\frac{1}{n_h}\frac{n_\tau}{T}. \qquad (1.13)$$

Численное решение (1.12) используем, следуя описанному выше алгоритму, при вычислении функционалов (1.5).

Описание постановки и алгоритма численного решения вспомогательных краевых задач. Рассмотрим постановку и алгоритм численного решения вспомогательных краевых задач (1.8) и (1.9). Для численного решения этих задач используем разностную аппроксимацию:

$$\frac{\partial W1}{\partial t}\approx\frac{W1_{i-1,j}-W1_{i-1,j-1}}{\tau};\qquad \frac{\partial W1}{\partial x}=\frac{W1_{i,j}-W1_{i-1,j}}{h}, \qquad (1.14)$$

$$\frac{\partial W2}{\partial t}\approx\frac{W2_{i-1,j}-W2_{i-1,j-1}}{\tau};\qquad \frac{\partial W2}{\partial x}\approx\frac{W2_{i,j}-W2_{i-1,j}}{h}, \qquad (1.15)$$

Подставив их в (1.8) и (1.9), соответственно, получим

$$\begin{aligned}&(1+nAc^{n-1})\left(\frac{W1_{i-1,j}-W1_{i-1,j-1}}{\tau}\right)+\frac{U}{h}(W_{i,j}-W_{i-1,j})+nA(n-1)c^{n-2}\frac{\partial c}{\partial t}W1_{i,j}+\\&+nc^{n-1}\frac{\partial c}{\partial t}=0\end{aligned}, \qquad (1.16)$$

$$\begin{aligned}&\frac{(1+nAc^{n-1})}{\tau}(W2_{i-1,j}-W2_{i-1,j-1})+\frac{U}{h}(W2_{i,j}-W2_{i-1,j})+nAc^{n-1}Lnc\frac{\partial c}{\partial t}W2_{i,j}+\\&+Ac^{n-1}\frac{\partial c}{\partial t}=0\end{aligned}, \qquad (1.17)$$

Из разностных соотношений (1.16)- (1.17) выразим $W1_{i,j}$ и $W2_{i,j}$

$$\begin{aligned}&W1_{i,j}=W1_{i-1,j}-\frac{h}{U\tau}(1+nAc^{n-1}_{i,j})(W1_{i-1,j}-W1_{i-1,j-1})-\\&-\frac{h}{U}((nA(n-1)C^{n-2}_{i,j}\frac{\partial c_{i,j}}{\partial\tau})W1_{i,j}-nC^{n-1}_{i,j}\frac{\partial c_{i,j}}{\partial\tau})\end{aligned}, \qquad (1.18)$$

$$W2_{i,j}=W2_{i-1,j}-\frac{h}{U\tau}(1+nAc_{i,j}^{n-1})(W2_{i-1,j}-W2_{i-1,j-1})-$$
$$-\frac{h}{U}(nAC_{i,j}^{n-2}Ln\frac{\partial c_{i,j}}{\partial\tau}W2_{i,j}-AC_{i,j}^{n-1}\frac{\partial c_{i,j}}{\partial\tau}), \qquad (1.19)$$

Отсюда, для итерационного метода Зейделя имеем разностные постановки задач:
- для W1:

$$W1_{i,j}^{k}=W1_{i-1,j}^{k-1}-\frac{h}{U\tau}(1+nAC_{i,j}^{n-1})(W1_{i-1,j}^{k-1}-W1_{i-1,j-1}^{k-1})-$$
$$-\frac{h}{U}((nA(n-1)C_{i,j}^{n-2}\frac{\partial c_{i,j}}{\partial\tau})W1_{i,j}^{k-1}-nC_{i,j}^{n-1}\frac{\partial c_{i,j}}{\partial\tau}); \qquad , \qquad (1.20)$$
$$W1_{i,0}=0, W1_{0,j}=0.$$

- для W2:

$$W2_{i,j}^{k}=W2_{i-1,j}^{k-1}-\frac{h}{U\tau}(1+nAC_{i,j}^{n-1})(W2_{i-1,j}^{k-1}-W2_{i-1,j-1}^{k-1})-$$
$$-\frac{h}{U}((nA(n-1)C_{i,j}^{n-2}\frac{\partial c_{i,j}}{\partial\tau})W2_{i,j}^{k-1}-AC_{i,j}^{n-2}\frac{\partial c_{i,j}}{\partial\tau}); \qquad , \qquad (1.21)$$
$$W2_{i,0}=0, W2_{0,j}=0.$$

Численные решения для краевых задач (1.20) и (1.21) используем, следуя описанному выше алгоритму, для определения коэффициентов чувствительности W1 и W2. Коэффициенты W1 и W2 дают возможность вычислить функционалы (1.5) и восстановить функцию $f(c)=\Gamma\cdot c^{n}$.

УДК 004.946

СОЗДАНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКИХ ИНТЕРНЕТ-РЕСУРСОВ НА JOOMLA ДЛЯ СТУДЕНТОВ ТЕХНИЧЕСКОГО УНИВЕРСИТЕТА

Щукин М.В.
Белорусский национальный технический университет

Аннотация. *В связи с развитием телекоммуникационной возможности связи возросли потребности в создании сайта для студентов. Этот сайт может содержать варианты заданий для самостоятельной работы, материалы для студентов, результаты контрольных работ, список студентов, имеющих задолженности по сдаче заданий преподавателю. В работе рассматривается возможность создания интернет ресурса на Joomla.*
Ключевые слова: *сайт, интернет ресурс, создание и поддержка сайта, администрирование сайта.*

Наряду с использованием в учебном процессе онлайн-консультаций, переписки по электронной почте со студентами, возникает необходимость опубликовать в сети интернет некоторые файлы и информацию для студентов. Это можно сделать разными способами. Например, можно опубликовать в социальной сети типа «В контакте», «Facebook», «Instagram». Однако, возникают технические проблемы, поскольку доступ к социальным сетям в университете закрыт. Можно воспользоваться услугами бесплатного хостинга типа «Narod.ru». Вместе с хостингом этот ресурс обладает еще и бесплатным конструктором сайтов. Основные проблемы, связанные с бесплатным хостингом: хорошие имена уже заняты, ограниченная функциональность, многие хостинги имеют платные расширения. При этом, по отзывам, бесплатный хостинг часто плохо работает или недоступен и хостинговая компания предлагает купить платные услуги. Другой путь создания сайта: воспользоваться плат-