УДК 519.6

М.Р. ПЕТРИК, Д.М. МИХАЛИК, О.Ю.ПЕТРИК, І.В. КОРДЯК
Тернопільський національний технічний університет імені Івана Пулюя

ЗАДАЧА РЕТРОСПЕКТИВНОЇ ІДЕНТИФІКАЦІЇ КІНЕТИЧНИХ ПАРАМЕТРІВ ПРОЦЕСУ ВІДТИСКУ "ТВЕРДЕ ТІЛО–РІДИНА" ДЛЯ КОНСОЛІДОВАНИХ СЕРЕДОВИЩ ЧАСТИНОК МІКРОПОРИСТОЇ СТРУКТУРИ

Для моделей фільтрації-консолідації біологічних середовищ частинок мікропористої структури сформульовано задачу ретроспективної ідентифікації початкових тисків в міжчастинковому та внутрішньочастинковому просторах і тиску в рідкій фазі. Отримано аналітичний зв'язок між визначальними і лімітуючими параметрами процесу вологопереносу з урахуванням взаємовпливів мікро- і макропотоків. Розроблено високопродуктивні методи ідентифікації на основі аналітичних розв'язків прямих задач та виразів компонентів градієнтів функціоналів-нев'язки. Проведено числове моделювання з аналізу та ідентифікації параметрів початкових умов процесу консолідації та витиснення вологи.

Ключові слова: математичне моделювання, ідентифікація, кінетичні параметри, мікропористі частинки.

М.Р. ПЕТРИК, Д.М. МИХАЛИК, О.Ю.ПЕТРИК, І.В. КОРДЯК
Тернопольский национальный технический университет имени Ивана Пулюя

ЗАДАЧА РЕТРОСПЕКТИВНОЙ ИДЕНТИФИКАЦИЯ КИНЕТИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ ПРОЦЕССА ОТТИСКА "ТВЕРДОЕ ТЕЛО–ЖИДКОСТЬ" ДЛЯ КОНСОЛИДИРОВАННЫХ СРЕД ЧАСТИЦ МИКРОПОРИСТОЙ СТРУКТУРЫ

Для моделей фильтрации-консолидации биологических сред частиц микропористой структуры сформулирована задача ретроспективной идентификации начальных давлений в межчастичном и внутричастичном пространствах и давления в жидкой фазе. Получена аналитическая связь между определяющими и лимитирующими параметрами процесса влагопереноса с учетом взаимовлияния микро- и макропотоков. Разработаны высокопроизводительные методы идентификации на основе аналитических решений прямых задач и выражений компонентов градиентов функционалов-невязки. Проведено численное моделирование для анализа и идентификации параметров начальных условий процесса консолидации и вытеснения влаги.

Ключевые слова: математическое моделирование, идентификация, кинетические параметры, микропористые частицы.

M. PETRYK, D. MYKHALYK, O. PETRYK, I. KORDIAK
Ternopil National Ivan Pul'uj Technical University

THE PROBLEM OF RETROSPECTIVE IDENTIFICATION OF THE KINETIC PARAMETERS OF SOLID-LIQUID EXPRESSION FROM CONSOLIDATED MEDIUM OF MICRO-POROUS PARTICLES

The inverse time boundary identification problem in integral form for mass transfer systems in compressible biological media of moist saturated microporous particles is considered, which allows obtain explicit analytical expressions of components for residual functional gradients through the influence functions of initial and boundary conditions of direct problem.

The direct problem is formulated on the basis of differential equations system in partial derivatives of consolidation model taking into account the flow of fluid from the space of the micropore (intraparticle space) into the macroparticle space with the appropriate initial and boundary conditions. Conditions taking into account changes in the external pressure at initial moment in these spaces and in the output pressure of liquid phase. The analytical solution of direct problem was achieve with finite Fourier and Laplace integral transformations.

High-performance methods for the implementation of boundary identification problem based on analytical solutions of direct problems and expressions of components of functional-residual gradients was developed. Regularization expressions are formulated using gradient error minimization method to identify initial and boundary conditions functions for the n-th step of identification routine.

The proposed approach allowed to obtain an explicit analytical connection between the defining and limiting transfer parameters (pressures in the liquid phase in the space of micro and macropores and parameters and functions of the initial and boundary conditions) and gave a more complete view of internal mechanism of moisture transfer, taking into account the interactions of micro- and macro flows. These analytical dependencies were future used for numerical identification and analysis of some parameters of the model. In particular, the convergence process of distribution curves for dimensionless liquid flow at the exit from compressed layer of moisture-containing particles on observation surface are shown in routine of stepwise parameters identification of initial conditions - initial values for interparticle and intrarparticle spaces using regularization expressions.

Keywords: mathematical modeling, identification, kinetic parameters, micro porous particles.

Постановка проблеми

Моделювання технологічних систем зневоднення матеріалів біологічної природи, що містять вологонасичені мікропористі частинки, вимагає визначення ряду причинних характеристик, що визначають фізичні властивості так параметри початкові і граничні умови [1-2].

Аналіз останніх досліджень та публікацій

Механізми фільтрації-консолідації в різнопористих біологічних середовищах, що складаються з розгалужених мереж мікро- і макропор, утворених просторами частинок, клітин, міжчастинкових і межклітинкових просторів детально нами розглянуті в [3, 4]. В [5, 6] розглядалася задача коефіцієнтної ідентифікації, щодо визначення розподілу внутрішніх кінетичних параметрів (коефіцієнтний дифузії, коефіцієнтів консолідації в міжчастинковому і внутрішньочастинковому просторах і ін.) з отриманням явних градієнтів функціоналів-нев'язки на основі маловитратних аналітичних розв'язків прямої і спряженої задач та градієнтних методів мінімізації функціонала-нев'язки. Подібні задачі ідентифікації були розглянуті в [7] з використанням чисельних методів дискретизації.

Разом з тим, з огляду на зміни напружено-деформованого стану волого-пористого середовища під дією зовнішніх градієнтів тиску, актуальними є граничні і особливо, звернені назад в часі зворотні задачі вологомасопереносу, що полягають у знаходженні функцій і параметрів, що входять в початкові і граничні умови, які визначають основні стадії консолідації та витіснення вологи. У більшості досліджень для подібних задач ідентифікації використовується підхід, який базується на обчисленні градієнта функціонала-нев'язки при розв'язанні відповідних спряжених задач. Однак, як показано в [8], для випадків, коли є можливість побудувати аналітичний розв'язок прямої задачі, зокрема і виражений через функції впливу Коші або Гріна, можна обійтися без розв'язання спряжених задач, істотно зменшивши таким чином час і обчислювальні ресурси на процедури регуляризації.

Мета дослідження

В роботі розглядаються обернена в часі гранична задача ідентифікації в інтегральній формі для систем масопереносу в стискуваних біологічних середовищах вологонасичених мікропористих частинок, яка дозволяє отримувати явні аналітичні вирази компонентів градієнтів функціоналів-нев'язок через функції впливу початкових і крайових умов прямої задачі.

Викладення основного матеріалу дослідження

Пряма задача. Формулюється на підставі системи диференціальних рівнянь в частинних похідних моделі консолідації, що враховують перетоки рідини з простору мікропор (intraparticle space) в простір макропрор скелета (macroparticle space) [4] з початковими та крайовими умовами, що враховують зміни зовнішнього тиску в початковий момент в цих просторах і вихідного тиску в рідкій фазі на фільтрувальній перегородці. В областях $\Omega_T = (0,T)\times(0,h)$ і $\Omega_T \times (0,R)$ розподілу тисків в рідкій фазі і відповідно задовольняють системі рівнянь консолідації в приватних похідних:

$$\frac{\partial P_1(t,z)}{\partial t} = b_1 \frac{\partial^2 P_1}{\partial z^2} - \beta \frac{\partial \overline{P}_2(t,z)}{\partial t}, \qquad z \in (0,h), \tag{1}$$

$$\frac{\partial P_2(t,x,z)}{\partial t} = b_2 \frac{\partial^2 P_2}{\partial x^2}, \; x \in (0,R), \; z \in (0,h), \; t \in (0,T), \tag{2}$$

Початкові і крайові умови:

$$P_1(t,z)\big|_{t=0} = P_{e_1}(z), \quad P_2\big|_{t=0} = P_{e_2}(R/2,z) \tag{3}$$

Крайові умови:

$$P_1(t,z)\big|_{z=0} = g_0(t), \qquad \frac{\partial P_1}{\partial z}\Big|_{z=h} = 0; \tag{4}$$

$$\frac{\partial P_2}{\partial x}\Big|_{x=0} = 0, \quad P_2(t,x,z)\big|_{x=R} = P_1(t,z), \tag{5}$$

де b_1, b_2 – коефіцієнти консолідації в міжчастинковому і внутрішньочастинковому просторах відповідно, β – фактор еластичності матеріалу, h – товщина шару, R – напівтовщина частинки, $P_1(t,z) = \frac{1}{R}\int_0^R P_2(t,x,z)dz$.

Функціонал-нев'язка, що мінімізує відхилення модельного розв'язку від експериментального сліду. для реалізації процедури ідентифікації невідомих кінетичних параметрів переносу в міжчастинковому і внутрішньочастинковому просторах (функцій і параметрів початкових умов P_{e_1}, P_{e_2} і нульової крайової умови g_0) запишеться у вигляді [9]:

$$J(P_{e_1}, P_{e_2}, g_0) = \frac{1}{2}\int_0^T\int_0^h \left[E_{err}(P_{e_1}, P_{e_2}, g_0, t, z, \gamma)\right]^2 dzdt. \tag{7}$$

Тут $E_{err}(P_{e_1}, P_{e_2}, g_0, t, z, \gamma)$ – вираз нев'язки між модельними і експериментальними значеннями шуканих параметрів:

$$E_{err}(P_{e_1}, P_{e_2}, g_0, t, z, \gamma) = \left[-\left(\frac{1}{\mu r_1}\frac{\partial}{\partial z}P_1(t, z; P_{e_1}, P_{e_2}, g_0) + \frac{1}{\mu r_2}\frac{\partial}{\partial z}\overline{P_2}(t, z; P_{e_1}, P_{e_2}, g_0)\right) - M_{\exp r}(t, z)\right]_{z=\gamma} \tag{8}$$

$M_{\exp r}(t, z)$ – вектор експериментальних даних на поверхні вимірів.

Побудова розв'язку моделі. Застосовуючи до рівняння (2) з умовами (3), (5) скінченне інтегральне перетворення Фур'є (Cos-Фур'є), визначене інтеґральними операторами [9], отримуємо єдиний розв'язок задачі у вигляді функції:

$$P_2(t, x, z) = \frac{2}{R}\sum_{m=0}^{\infty}\left[P_{e_2}(R/2, z)e^{-b_2\eta_m^2 t} + b_2\eta_m^2\int_0^t e^{-b_2\eta_m^2(t-\tau)}P_1(\tau, z)dz\right]\frac{(-1)^m\cos\eta_m x}{\eta_m} \tag{9}$$

тут $\vartheta(x, \eta_m) = \cos\eta_m x$, $\eta_m = \dfrac{2m+1}{2R}\pi$, $m = \overline{0, \infty}$ – спектральні функції і спектральні значення інтегрального перетворення Фур'є.

Після підстановки у інтегральне рівняння консолідації виразу для усередненого по радіусу тиску в частинці та застосування інтегрального перетворення Лапласа по змінній *t*, в припущенні, що всі задані і шукані функції є оригіналами по Лапласа, після ряду перетворень отримаємо задачу Коші [10]:

$$\frac{d^2P_0^*}{dz^2} - \frac{s}{b_1}\left(1 - \beta\frac{2}{R^2}\sum_{m=0}^{\infty}\frac{1}{\frac{s}{b_2} + \eta_m^2}\right)P_1^*(s, z) + \frac{1}{b_1}\left[P_{e_1}(z) - \beta\left[1 - \frac{2}{R^2}\sum_{m=0}^{\infty}\frac{1}{\eta_m^2\left(\frac{s}{b_2} + \eta_m^2\right)}\right]P_{e_2}(R/2, z)\right] = 0 \tag{10}$$

$$P_1^*\big|_{z=0} = g_0(t); \qquad \frac{dP_1^*}{dz}\Big|_{z=h} = 0. \tag{11}$$

Застосуємо до отриманої задачі скінченне інтегральне перетворення Фур'є (Sin-Фур'є), визначене інтегральними операторами [11], отримає вираз:

$$P_{1,n}^*(s) = \frac{1}{s + b_1\lambda_n^2 - \beta\sqrt{s}\frac{\sqrt{b_2}}{R}th\sqrt{\frac{s}{b_2}}R}\left[b_1\lambda_n g_0^*(s) + P_{e_1 n} - \beta\frac{sh\sqrt{\frac{s}{b_2}}R}{R\sqrt{\frac{s}{b_2}}ch\sqrt{\frac{s}{b_2}}R}P_{e_2 n}\right]. \tag{12}$$

Який після повернення до оригіналу для функції $P_1^*(s)$ та застосування теореми про розкладання Хевісайда [10], набуде вигляду:

$$P_1(t,z)=\frac{2}{h}\sum_{n=0}^{\infty}\sum_{j=0}^{\infty}\frac{1}{1-\beta\frac{\sqrt{b_2}}{2R}\left(\frac{1}{\nu_{jn}}tg\frac{\nu_{jn}R}{\sqrt{b_2}}+\frac{1}{\cos^2\frac{\nu_{jn}R}{\sqrt{b_2}}}\frac{R}{\sqrt{b_2}}\right)}*$$

$$*\left[\begin{array}{l}\int_0^t e^{-\nu_{jn}^2(t-\tau)}b_1\lambda_n\sin(\lambda_n z)g_0(\tau)d\tau+\int_0^h e^{-\nu_{jn}^2 t}\sin(\lambda_n\xi)\sin(\lambda_n z)P_{e_1n}(\xi)d\xi-\\ -\beta\int_0^t\int_0^h e^{-\nu_{jn}^2(t-\tau)}\left(1+\frac{2}{R^2}\sum_{k=0}^{\infty}b_2e^{-b_2\eta_k^2\tau}\right)\sin(\lambda_n\xi)\sin(\lambda_n z)P_{e_2n}(R/2,\xi)d\xi d\tau\end{array}\right] \quad (13)$$

Тут $\eta_k=\frac{2k+1}{2R}\pi$, $k=\overline{0,\infty}$ – ненульові корені рівняння $\cos\eta_k R=0$, $\nu_{jn}, n=\overline{1,\infty}$ – корені трансцендентного рівняння:

$$\nu^2-b_1\lambda_n^2-\beta\nu\frac{\sqrt{b_2}}{R}tg\frac{\nu R}{\sqrt{b_2}}=0. \quad (14)$$

Регуляризаційні вирази. Використовуючи градієнтний метод мінімізації похибки для ідентифікації функцій початкових умов P_{e_1}, P_{e_2} і граничної умови, регулярізаційні вирази для *n*-ого кроку ідентифікації мають вигляд [12, 13]:

$$P_{e_1}^{n+1}(z)=P_{e_1}^n(z)-\nabla J_{P_{e_1}}^n(z)\frac{E_{err}(P_{e_1}^n,P_{e_2}^n,g_0;0,z,\gamma)^2}{\left\|\nabla J_{P_{e_1}}^n(z)\right\|^2+\left\|\nabla J_{P_{e_1}}^n(z)\right\|^2},$$

$$P_{e_2}^{n+1}(z)=P_{e_2}^n(z)-\nabla J_{P_{e_2}}^n(z)\frac{E_{err}(P_{e_1}^n,P_{e_2}^n,g_0;0,z,\gamma)^2}{\left\|\nabla J_{P_{e_1}}^n(z)\right\|^2+\left\|\nabla J_{P_{e_1}}^n(z)\right\|^2},\quad z\in\Omega\quad,$$

$$g_0^{n+1}(t)=g_0^n(t)-\nabla J_{g_0}^n(t)\frac{E_{err}(P_{e_1}^n,P_{e_2}^n,g_0^{n_1};t,0,\gamma)^2}{\left\|\nabla J_{g_0}^{n_1}(t)\right\|^2},\quad t\in(0,T),$$

$\left\|\nabla J_{P_{e_1}}^n(z)\right\|^2=\int_0^h\left[\nabla J_{P_{e_1}}^n(z)\right]^2dz, i=\overline{1,2}$; $\left\|\nabla J_{g_0}^n(t)\right\|^2=\int_0^T\left[\nabla J_{g_0}^n(t)\right]^2dt$ – квадрати норм відповідних компонентів градієнта функціонала нев'язки $J(P_{e_1},P_{e_2},g_0)$ по шуканих функціях $P_{e_1}\in\Omega_T$, $P_{e_2}\in\Omega_T$, $g_0\in\Omega_T$.

Числовий аналіз. Нижче наведено отримані результати числового аналізу та ідентифікації параметрів початкових умов процесу консолідації і витиснення вологи. На рис.1 показано процес збіжності кривих розподілу безрозмірного потоку рідини на виході з стисненого шару вологомістких частинок на поверхні спостереження z = 0 до кривої спостереження (номер 6) при реалізації процедури покрокової ідентифікації параметрів функцій початкових умов – початкових значень в міжчастинковому і внутрішньочастинковому просторах з використанням регуляризаційних виразів. Значення коефіцієнтів консолідації в просторах макро- і мікропор прийняті відповідно $1.8\cdot10^{-7}$ м²/с і $1.0\cdot10^{-7}$ м²/с, отриманих в ході попередніх досліджень параметрів легко руйнуючихся тканин (better disrupted tissue). Значення інших параметрів, властивостей частинок і дані спостереження взяті з робіт [3, 4].

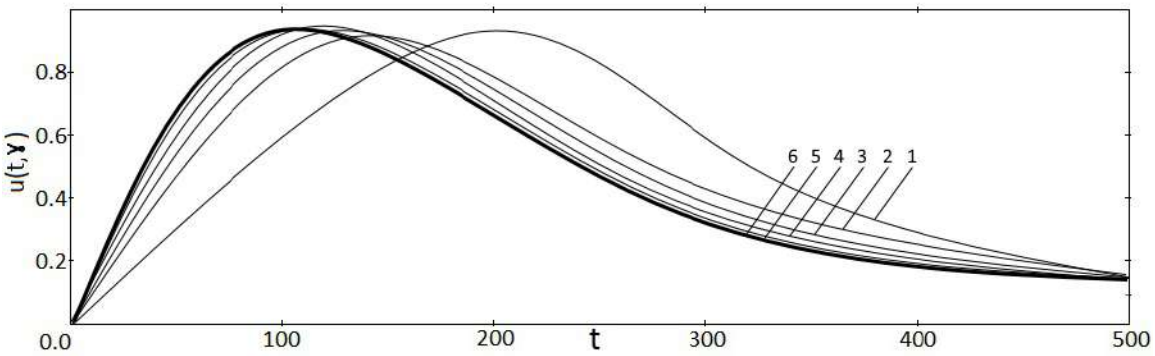
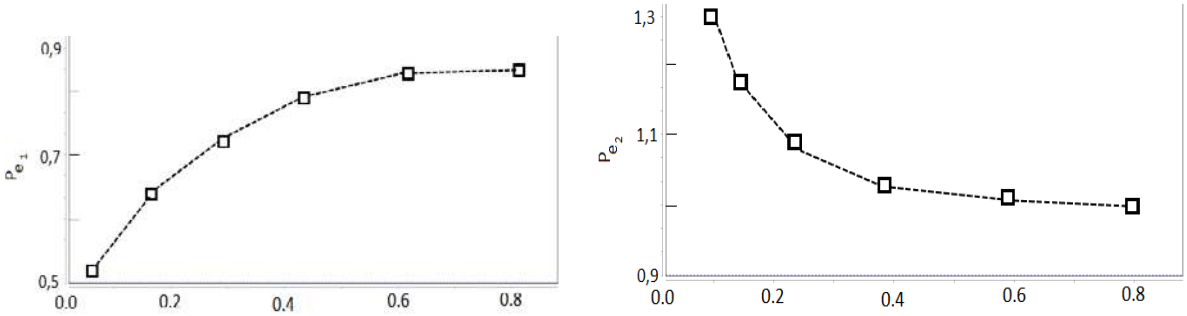


Рис. 1. Процес збіжності кривих розподілу безрозмірного потоку рідини на виході з стисненого шару вологомістких частинок на поверхні спостереження

Рис. 2 (а, б) ілюструє еволюції зміни початкових умов – значень тисків в рідкій фазі для міжчастинкового простору та простору мікропор вологомістких частинок, відновлюваних згідно приведених регуляризаційних залежностей. Як видно з рис. 2, для двох останніх блоків ітерацій спостерігається стабілізація наведених профілів початкових умов консолідації. Отримані початкові значення тисків тут реально відповідають не підготовчої стадії встановлення необходного тиску в системі, а другий – основній стадії консолідації і витиснення вологи з вологомістких частинок, що викликає градієнт тиску в мікропорах і відповідно макропорах міжчастинкового простору, за рахунок зниження тиску (зменшення вологи) в останньому.



а) міжчастинковий простір **б) внутрішньочастинковий простір**

Рис. 2. Еволюція початкових значень тисків в рідкій фазі відновлюваних згідно регуляризаційних залежностей

Висновки

У дослідженні сформульовано задачу ретроспективної ідентифікації початкових тисків в міжчастинковому та внутрішньочастинковому просторах і тиску в рідкій фазі на фільтрувальній перегородці для моделей фільтрації-консолідації біологічних середовищ частинок мікропористої структури, що стискаються, з використанням функціоналів-нев'язки та врахуванням зміни сумарного потоку рідини на поверхні спостереження. Розроблено високопродуктивні методи реалізації задачі граничної ідентифікації на основі аналітичних розв'язків прямих задач та виразів компонентів градієнтів функціоналів-нев'язки. Такий підхід дозволив отримати явний аналітичний зв'язок між визначальними і лімітують параметрами переносу (тисками в рідкій фазі в просторі мікро- і макропор і параметрів та функцій початкових і граничних умов) та надає більш повний опис внутрішнього механізму вологопереносу з урахуванням взаємовпливів мікро- і макропотоків. Отримані аналітичні залежності використано для проведення чисельної ідентифікації та аналізу деяких параметрів моделі.

Список використаної літератури

1. Barenblatt G.I. Theory of fluid flows through natural rocks / G.I. Barenblatt, V.M. Entov, V.M. Ryzhik. Dordrecht: Kluwer, 1990. – 303 p.

2. Shirato M. The Terzaghi-Voigt combined model for constant pressure consolidation of filter cakes and homogeneous semi-solid materials / M. Shirato, T. Murase, M. Iwata, S. Nakatsuka // Chemical Engineering Science. – 1986. – № 41. – P. 3213-3218.
3. Petryk M. Numerical and Analytical Modelling of Solid-Liquid Expression from Soft Plant Materials / M. Petryk, E. Vorobiev // AIChE Journal. Wiley USA. –2013. – № 59(12). – P. 4762–4771.
4. Petryk M. Liquid Flowing from Porous particles During the Pressing of Biological Materials / M. Petryk, E. Vorobiev // Computer & Chem. Eng. – 2007. – № 31(10). – P. 1336-1345.
5. Petryk M. Competitive Diffusion of Gases in a Zeolite Bed: NMR and Slice Selection Procedure, Modelling and Parameter Identification / M. Petryk, S. Leclerc, D. Canet, I. Sergienko, V. Deineka, J. Fraissard // The Journal of Physical Chemistry **C.** ACS (USA). – 2015. – Vol. 119. – Issue 47. – P. 26519–26525.
6. Petryk M. High Velocity Identification Methods of the Model Parameters of Filtration-Consolidation of Compressible Media of Moisture-Saturated Micro-Porous Particles / M. Petryk // Journal of Automation and Information Sciences. Begell House (USA). – 2016. – Vol. 48. – Issue 1. – P. 69-83.
7. Сергиенко И.В. Идентификация параметров некоторых задач фильтрации-консолидации влагонасыщенных микропористых сред / И.В. Сергиенко, В.С. Дейнека // Кибернетика и системный анализ. – 2015. – № 2. – С. 89-107.
8. Алифанов О.М. Обратные задачи теплообмена / О.М. Алифанов. – М.: Машиностроение, 1988. – 280 с.
9. Сергиенко І.В. Математичне моделювання масопереносу в середовищах частинок нанопористої структури / І.В. Сергиенко, М.Р. Петрик, О.М. Химич, Д. Кане, Д.М. Михалик, С. Леклерк, Ж. Фресар. – К.: Національна академія наук України. Інститут кібернетики імені В.М. Глушкова, 2014. – 210 с.
10. Лаврентьев М.А. Методы теории функций комплексного переменного / М.А. Лаврентьев, Б.В. Шабат. – М.: Наука, 1973. – 736 с.
11. Ленюк М.П. Інтегральні перетворення Фур'є, Бесселя із спектральним параметром в задачах математичного моделювання масопереносу в неоднорідних середовищах / М.П. Ленюк. − К: Наукова думка, 2000. – 372 с.
12. Petryk M. Retrospective Identification Problem in Integrated Form for Systems of Filtration– Consolidation of Compressible Media of Liquid Contained Microporous Particles / M. Petryk // Journal of Automation and Information Sciences, Begell House USA. – 2016. – Vol. 48. – Issue 8. – P. 1-14.
13. Сергиенко И.В. Системный анализ многокомпонентных распределенных систем / И.В. Сергиенко, В.С. Дейнека. –К.: Наукова думка, 2009. – 639 с.