ЖУРНАЛ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ МАТЕМАТИКИ И МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ, 2002, том 42, № 3, с. 410–416

УДК 519.634

АСИМПТОТИЧЕСКОЕ ПОВЕДЕНИЕ РЕШЕНИЯ ЛИНЕЙНОЙ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ КАСКАДА ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНО СОЕДИНЕННЫХ СОРБЦИОННЫХ АППАРАТОВ

© 2002 г. Л. Н. Бондаренко, П. Ф. Жук

(73034 Херсон, ул. Фонвизина, 1, Педуниверситет, Украина)
E-mail: hfzui@tlc.kherson.ua

Поступила в редакцию 12.07.00 г.
Переработанный вариант 10.05.01 г.

Исследуется асимптотическое поведение последовательностей вектор-функций $\mathbf{a}_k$, $\mathbf{c}_k$, $k = 1, 2, \ldots$, образующих решение линейной математической модели каскада последовательно соединенных сорбционных аппаратов периодического действия. Показано, что они сходятся к своим пределам $\mathbf{a}_\infty$, $\mathbf{c}_\infty$, описывающим установившийся режим работы каскада, вдоль некоторых асимптотических направлений со скоростью геометрической прогрессии. Этот результат использован для повышения эффективности расчета предельных вектор-функций $\mathbf{a}_\infty$, $\mathbf{c}_\infty$.

ВВЕДЕНИЕ

Сорбционные процессы находят широкое практическое применение, например, при очистке сточных вод в промышленном водоснабжении [1]. Математическому моделированию этих процессов посвящена обширная литература; наиболее полно в настоящее время исследованы математические модели динамики сорбции вещества в одиночной колонке (см., например, [2]–[5]).

Весьма эффективно сорбционные процессы протекают в каскадах последовательно соединенных сорбционных аппаратов, математическому моделированию которых посвящены работы [6]–[10].

Каскад состоит из нескольких последовательно соединенных одинаковых колонок с неподвижным слоем сорбента, через которые протекает поток сорбируемого вещества. Его работа циклична, и после окончания любого цикла аппарат на входе выводится на регенерацию, а в конец каскада подключается аппарат со свежим сорбентом. Переключение аппаратов осуществляется обычно либо при достижении выходной концентрации вещества в потоке предельно допустимого значения, либо периодически.

Практика применения каскадов показывает, что с ростом числа циклов работа каскада стабилизируется и он выходит на установившийся режим работы. Этот режим является важнейшей характеристикой каскада и используется для оптимизации его работы (см. [6]–[9]). Однако, несмотря на важность установившегося режима, доказательство его существования в рамках используемой математической модели было дано, по-видимому, впервые в [10]: доказано, что последовательности функций, составляющих решение линейной математической модели каскада, равномерно сходятся к некоторым предельным функциям, описывающим установившийся режим.

Эти последовательности можно рассматривать как результат применения метода последовательных приближений к определенным линейным операторным уравнениям в пространстве непрерывных функций. Для таких последовательностей, как известно (см., например, [11, с. 36]), интерес представляет их асимптотическое поведение, позволяющее в ряде случаев по двум последовательным приближениям образовывать новое приближение, которое существенно ближе к точному решению операторного уравнения, чем составляющие его приближения, взятые в отдельности. Формула, по которой образуется это более точное приближение, называется (см. [11, с. 36]) формулой ускорения сходимости или формулой уточнения последнего найденного приближения в зависимости от стратегии ее применения; для краткости такие формулы будем называть формулами уточнения.

Целью данной работы является изучение асимптотического поведения последовательностей функций, составляющих решение линейной математической модели каскада, и построение формул уточнения, позволяющих повысить эффективность расчета предельных функций, описывающих установившийся режим работы каскада.

1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Рассмотрим линейную математическую модель [10] каскада n последовательно соединенных сорбционных аппаратов с периодическим переключением и постоянной (равной 1) входной концентрацией вещества, представляющую собой бесконечное множество задач Гурса в прямоугольнике $\Pi = [0, l] \times [0, T]$:

$$\partial c_{ik}/\partial x = a_{ik} - c_{ik}, \quad \partial a_{ik}/\partial t = c_{ik} - a_{ik}, \quad (x, t) \in \Pi, \tag{1.1а}$$

$$c_{ik}(0, t) = \psi_{ik}(t), \quad 0 \le t \le T, \quad a_{ik}(x, 0) = \varphi_{ik}(x), \quad 0 \le x \le l, \tag{1.1б}$$

где l – длина одного аппарата, T – длительность одного цикла работы каскада, i ($i = 1, 2, \ldots, n$) – номер аппарата, отсчитываемый от входа в каскад, k ($k = 1, 2, \ldots$) – номер цикла, t – локальное время k-го цикла, отличающееся от глобального времени на константу $(k - 1)T$ (в начале k-го цикла $t = 0$), x – локальное расстояние i-го аппарата (отсчитываемое от начала i-го аппарата), $a_{ik}(x, t)$, $c_{ik}(x, t)$ – концентрации вещества, соответственно, в сорбенте и потоке в точке x i-го аппарата в момент времени t k-го цикла.

Начальное и граничное условия задачи Гурса (1.1) для i-го аппарата на k-м цикле определяются состояниями $(i + 1)$-го аппарата на $(k - 1)$-м цикле и $(i - 1)$-го аппарата на k-м цикле при помощи условий согласования

$$\varphi_{ik}(x) = \begin{cases} 0, & k = 1, \quad i = 1, 2, \ldots, n, \\ a_{i+1, k-1}(x, T), & k > 1, \quad i = 1, 2, \ldots, n-1, \\ 0, & k \ge 1, \quad i = n; \end{cases} \tag{1.2а}$$

$$\psi_{ik}(t) = \begin{cases} 1, & k \ge 1, \quad i = 1, \\ c_{i-1, k}(l, t), & k \ge 1, \quad i = 2, 3, \ldots, n. \end{cases} \tag{1.2б}$$

Условие $\varphi_{i1}(x) = 0$ означает, что в начале работы каскад свободен от вещества. Условия $\varphi_{ik}(x) = a_{i+1, k-1}(x, T)$ и $\varphi_{nk}(x) = 0$ отражают способ переключения аппаратов: $(i + 1)$-й аппарат на $(k - 1)$-м цикле становится i-м на k-м цикле; при этом аппарат, бывший первым на $(k - 1)$-м цикле, на k-м цикле изымается из каскада, а в конец каскада подключается аппарат, свободный от вещества. Условие (1.2б) выражает тот факт, что на вход каскада подается поток с постоянной (равной 1) концентрацией вещества и что вещество непрерывно распределено в потоке (концентрация вещества в потоке на выходе $(i - 1)$-го аппарата равна концентрации вещества на входе i-го аппарата).

Под решением математической модели (1.1), (1.2) понимаются решения $a_{ik}(x, t)$, $c_{ik}(x, t)$, $i = 1, 2, \ldots, n$, $k = 1, 2, \ldots$, задач Гурса (1.1), непрерывные вместе со своими частными производными $(a_{ik})'_t$, $(c_{ik})'_x$ в прямоугольнике Π и удовлетворяющие условиям согласования (1.2).

В [10] доказано, что последовательности функций $a_{ik}(x, t)$, $c_{ik}(x, t)$, $k = 1, 2, \ldots$, равномерно сходятся на прямоугольнике Π к некоторым предельным функциям $a_{i\infty}(x, t)$, $c_{i\infty}(x, t)$, описывающим установившийся режим работы каскада. Таким образом, приближенный расчет установившегося режима работы каскада сводится к вычислению (например, методом сеток) функций $a_{ik}(x, t)$, $c_{ik}(x, t)$ с достаточно большим (зависящим от требуемой точности) номером k.

С целью повышения эффективности расчета предельных функций $a_{i\infty}(x, t)$, $c_{i\infty}(x, t)$ в данной работе рассмотрены следующие две задачи:

1) установить характер приближения последовательности $a_{ik}(x, t)$, $k = 1, 2, \ldots$, к $a_{i\infty}(x, t)$ путем выделения из ошибки $a_{ik}(x, t) - a_{i\infty}(x, t)$ главного члена разложения (аналогично – для последовательности $c_{ik}(x, t)$);

2) найти, используя особенности асимптотического поведения последовательности $a_{ik}(x, t)$, формулу уточнения, позволяющую по двум последовательным приближениям $a_{i, k-1}(x, t)$, $a_{ik}(x, t)$ образовывать новое приближение, существенно более точное, чем приближения $a_{i, k-1}(x, t)$, $a_{ik}(x, t)$, взятые в отдельности (аналогично – для последовательности $c_{ik}(x, t)$).

2. АСИМПТОТИЧЕСКОЕ ПОВЕДЕНИЕ РЕШЕНИЯ

Для краткости записи введем следующие вектор-функции:

$$\mathbb{a}_k(x, t) = (a_{1k}(x, t), \ldots, a_{nk}(x, t)), \quad \mathbb{c}_k(x, t) = (c_{1k}(x, t), \ldots, c_{nk}(x, t)),$$

описывающие процесс сорбции в каскаде на k-м цикле (включая и установившийся режим работы при $k = \infty$).

Обозначим через $C(\Pi)$ вещественное банахово пространство непрерывных на прямоугольнике Π функций $u = u(x, t)$ с нормой $\|u\| = \max\limits_{\Pi}|u(x, t)|$, а через $C(\Pi)^n = C(\Pi) \times \ldots \times C(\Pi) = \{\mathbb{u} = (u_1, \ldots$ $\ldots, u_n) \mid u_i \in C(\Pi), i = 1, 2, \ldots, n\}$ – банахово пространство вектор-функций с нормой $\|\mathbb{u}\| = \max\limits_{i = 1, 2, \ldots, n} \|u_i\|$.

Асимптотическое поведение последовательностей $\mathbb{a}_k$, $\mathbb{c}_k$ характеризует

Теорема. *Пусть $n > 1$, $l > 0$, $T > 0$. Тогда существуют вещественные числа ρ, r $(0 < r < \rho < 1)$, вектор-функции $\mathbb{u}$, $\mathbb{w} \in C(\Pi)^n$ $(u_i(x, t) > 0, w_i(x, t) > 0$ при $x > 0, t > 0, i = 1, 2, \ldots, n)$ и сходящиеся к нулю в пространстве $C(\Pi)^n$ последовательности $\mathbb{u}_k$, $\mathbb{w}_k$, зависящие от n, l, T, такие, что для любого $k = 1, 2, \ldots$ имеют место разложения*

$$\mathbb{a}_k = \mathbb{a}_\infty - \rho^k\mathbb{u} - r^k\mathbb{u}_k, \quad \mathbb{c}_k = \mathbb{c}_\infty - \rho^k\mathbb{w} - r^k\mathbb{w}_k. \tag{2.1}$$

Для доказательства теоремы воспользуемся аналитическим решением математической модели (1.1), (1.2), полученным в [12].

Обозначим через $U(y)$ бесконечную тёплицеву треугольную матрицу

$$U(y) = [f_{i-j}(y)]_{i, j = 0, \infty} = \begin{bmatrix} f_0(y) & 0 & 0 & 0\ldots \\ f_1(y) & f_0(y) & 0 & 0\ldots \\ f_2(y) & f_1(y) & f_0(y) & 0\ldots \\ . & . & . & . \end{bmatrix},$$

а через $V(y)$ – бесконечную ганкелевую матрицу

$$V(y) = [f_{i+j+1}(y)]_{i, j = 0, \infty} = \begin{bmatrix} f_1(y) & f_2(y) & f_3(y) & \ldots \\ f_2(y) & f_3(y) & f_4(y) & \ldots \\ f_3(y) & f_4(y) & f_5(y) & \ldots \\ . & . & . & . \end{bmatrix},$$

где

$$f_m(y) = \begin{cases} 0 \quad \text{при} \quad m < 0, \\ \dfrac{y^m}{m!} \quad \text{при} \quad m = 0, 1, \ldots. \end{cases}$$

Образуем последовательности вещественных чисел $\alpha_i^{(k)} = (\alpha_{i1}^{(k)}, \alpha_{i2}^{(k)}, \ldots)$, $\xi_i^{(k)} = (\xi_{i0}^{(k)}, \xi_{i1}^{(k)}, \ldots)$ с помощью рекуррентных соотношений:

$$\begin{gathered} \alpha_1^{(k-1)} = e^l\mathbb{1}, \quad \alpha_{i+1}^{(k-1)} = e^{-l}U(l)\alpha_i^{(k-1)} + V(l)\xi_i^{(k-1)}, \\ \xi_i^{(k)} = e^{-(l+T)}V(T)\alpha_{i+1}^{(k-1)} + e^{-T}U(T)\xi_{i+1}^{(k-1)}, \quad \xi_n^{(k)} = 0, \quad i = 1, 2, \ldots, n-1, \quad k = 2, 3, \ldots, \end{gathered} \tag{2.2}$$

где $\xi_i^{(1)} = 0$, $i = 1, \ldots, n$, $\mathbb{1} = (1, 1, \ldots)$ – последовательность единиц. Решение математической модели (1.1), (1.2) задается формулами (см. [12])

$$\begin{aligned} a_{ik}(x,t) &= e^{-(x+t)}\left[e^{-l}\sum_{j=1}^{\infty}\sum_{p=1}^{j}\alpha_{ip}^{(k)}f_{j-p}(x)f_j(t)+\sum_{j=0}^{\infty}\sum_{p=0}^{\infty}\xi_{ip}^{(k)}f_{p+j}(x)f_j(t)\right],\\ c_{ik}(x,t) &= e^{-(x+t)}\sum_{j=0}^{\infty}\left[e^{-l}\sum_{p=1}^{j+1}\alpha_{ip}^{(k)}f_{j+1-p}(x)+\sum_{p=0}^{\infty}\xi_{ip}^{(k)}f_{p+j+1}(x)\right]f_j(t). \end{aligned} \tag{2.3}$$

Формулы (2.2), (2.3) позволяют свести изучение асимптотического поведения последовательностей $\mathbb{a}_k$, $\mathbb{c}_k$ к изучению асимптотического поведения последовательностей $\xi_i^{(k)}$, $i = 1, 2, \ldots, n-1$.

Обозначим через B вещественное банахово пространство ограниченных числовых последовательностей $\xi = (\xi_0, \ldots, \xi_j, \ldots)$ с нормой $\|\xi\| = \sup\limits_{j=0,1,\ldots}|\xi_j|$, а через $B^{n-1} = B\times\ldots\times B = \{\boldsymbol{\xi} = (\xi_1, \ldots$ $\ldots, \xi_{n-1}) \mid \xi_i = (\xi_{i0}, \ldots, \xi_{ij}, \ldots) \in B\}$ – банахово пространство векторов, компонентами которых являются последовательности из B, с нормой $\|\boldsymbol{\xi}\| = \max\limits_{i=1,2,\ldots,n-1}\|\xi_i\|$. Кроме того, обозначим через $K = \{\xi \in B \mid \xi_j \ge 0, j = 0, 1, \ldots\}$ конус пространства B, состоящий из неотрицательных последовательностей, через $K^{n-1} = K\times\ldots\times K$ – конус пространства B^{n-1}, через K_+^{n-1} – внутренность конуса K^{n-1}.

Положим $\boldsymbol{\xi}_k = (\xi_1^{(k)}, \ldots, \xi_{n-1}^{(k)})$, $\Delta\boldsymbol{\xi}_k = (\Delta\xi_1^{(k)}, \ldots, \Delta\xi_{n-1}^{(k)}) = \boldsymbol{\xi}_{k+1} - \boldsymbol{\xi}_k$. Из соотношений (2.2) следует, что для $i = 1, 2, \ldots, n-1$ имеют место равенства

$$\Delta\xi_i^{(k)} = \sum_{j=1}^{i}e^{-(i-j+1)l-T}V(T)U^{i-j}(l)V(l)\Delta\xi_j^{(k-1)} + e^{-T}U(T)\Delta\xi_{i+1}^{(k-1)}, \tag{2.4}$$

где $\Delta\boldsymbol{\xi}_1 = \boldsymbol{\xi}_2$, $\Delta\xi_n^{(k-1)} = 0$. Так как при любом фиксированном y матрицы $U(y)$, $V(y)$ задают линейные ограниченные операторы, действующие в пространстве B, то соотношения (2.4) можно записать в операторном виде:

$$\Delta\boldsymbol{\xi}_k = \mathcal{D}\Delta\boldsymbol{\xi}_{k-1}, \quad k = 2, 3, \ldots, \tag{2.5}$$

где $\mathcal{D}$ – линейный и ограниченный в пространстве B^{n-1} оператор, представленный операторной тёплицевой матрицей порядка $(n-1)$ с элементами $P_i = e^{-il}V(T)U^{i-1}(l)V(l)$, $i = 1, 2, \ldots, n-1$:

$$\mathcal{D} = e^{-T}\begin{bmatrix} P_1 & U(T) & 0 & \ldots & 0\\ P_2 & P_1 & U(T) & \ldots & 0\\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots\\ P_{n-2} & P_{n-3} & P_{n-4} & \ldots & U(T)\\ P_{n-1} & P_{n-2} & P_{n-3} & \ldots & P_1 \end{bmatrix}. \tag{2.6}$$

Лемма 1. *Если $n > 1$, $l > 0$, $T > 0$, то $\mathcal{D}$ – сжимающий оператор.*

Доказательство. Оценим $\|\mathcal{D}\|$. Пусть $\boldsymbol{\zeta} = \mathcal{D}\boldsymbol{\eta}$, где $\boldsymbol{\eta}$ – произвольный единичный элемент пространства B^{n-1}. Из определения оператора $\mathcal{D}$ следует, что

$$\zeta_i = e^{-(l+T)}V(T)\beta_{i+1} + e^{-T}U(T)\eta_{i+1}, \tag{2.7}$$

где $\eta_n = 0$, $\beta_1 = 0$, и

$$\beta_{i+1} = e^{-l}U(l)\beta_i + V(l)\eta_i, \quad i = 1, 2, \ldots, n-1. \tag{2.8}$$

Так как $\|\eta_i\| \le 1$, то, последовательно оценивая β_{i+1}, $i = 1, 2, \ldots, n-1$, в (2.8), находим, что

$$\|\beta_i\| \le e^l(1 - e^{-(n-1)l}), \quad i = 1, 2, \ldots, n. \tag{2.9}$$

Аналогично, с помощью соотношений (2.7), (2.9) оцениваем ζ_i:

$$\|\zeta_i\| \le 1 - e^{-(n-1)l}(1 - e^{-T}), \quad i = 1, 2, \ldots, n-1,$$

т.е. $\|\mathcal{D}\| < 1$ и оператор $\mathcal{D}$ сжимающий. Лемма доказана.

Из соотношения (2.5) и леммы 1 вытекает абсолютная сходимость ряда $\Delta\xi_1 + \ldots + \Delta\xi_k + \ldots$; следовательно, существует предел $\xi_\infty = \lim\limits_{k\to\infty}\xi_k$. Переходя к пределу по $k \longrightarrow \infty$ в соотношениях (2.2), (2.3), получаем аналитические выражения функций $a_{i\infty}$, $c_{i\infty}$, описывающих установившийся режим работы каскада. Кроме того, аналогично (2.5) имеем

$$\eta_k = \mathcal{D}\eta_{k-1}, \quad k = 2, 3, \ldots, \tag{2.10}$$

где $\eta_k = \xi_\infty - \xi_k$. Из соотношения (2.10) и леммы 1 вытекает, что последовательность ξ_k сходится к ξ_∞ по крайней мере со скоростью геометрической прогрессии. Уточним характер этой сходимости. Напомним (см. [11]), что оператор называется положительным относительно конуса, если он отображает этот конус в себя, и сильно положительным, если образ любой ненулевой точки конуса является его внутренней точкой.

Лемма 2. *Если $n > 1$, $l > 0$, $T > 0$, то оператор $\mathcal{D}^{n-1}$ является компактным и сильно положительным относительно конуса K^{n-1}.*

Доказательство. Воспользуемся представлением оператора $\mathcal{D}$ в виде операторной матрицы (2.6). Непосредственным вычислением убеждаемся, что элементами операторной матрицы $\mathcal{D}^{n-1}$ являются суммы произведений некоторых операторов $U(T)$, $P_1, \ldots, P_{n-1}$, причем каждое произведение содержит по крайней мере один из операторов $P_1, \ldots, P_{n-1}$. Заметим, что оператор $U(T)$ положителен относительно конуса K и при отображении точек конуса не увеличивает число нулевых компонент. Так как, кроме того, операторы $P_1, \ldots, P_{n-1}$ являются компактными и сильно положительными относительно конуса K, то таковыми же являются и элементы операторной матрицы $\mathcal{D}^{n-1}$. Следовательно, $\mathcal{D}^{n-1}$ – компактный и сильно положительный оператор относительно конуса K^{n-1}. Лемма доказана.

Асимптотическое поведение последовательности ξ_k характеризует

Лемма 3. *Пусть $n > 1$, $l > 0$, $T > 0$. Тогда существуют вещественные числа ρ, r $(0 < r < \rho < 1)$, вектор $\zeta \in K_+^{n-1}$ и сходящаяся к нулю в пространстве B^{n-1} последовательность ζ_k, зависящие от n, l, T, такие, что*

$$\xi_k = \xi_\infty - \rho^k\zeta - r^k\zeta_k, \quad k = 1, 2, \ldots. \tag{2.11}$$

Доказательство. Обозначим через ρ_1 спектральный радиус оператора $\mathcal{D}^{n-1}$. Так как, согласно лемме 2, оператор $\mathcal{D}^{n-1}$ компактен и сильно положителен, то (см. [13]) ρ_1 – единственное наибольшее по модулю его собственное значение, а соответствующее ρ_1 собственное подпространство B_1^{n-1} одномерно и порождается некоторым вектором из K_+^{n-1}. Таким образом,

$$B^{n-1} = B_1^{n-1} \oplus B_2^{n-1}, \tag{2.12}$$

где B_2^{n-1} – инвариантное относительно оператора $\mathcal{D}^{n-1}$ подпространство, сужение на котором оператора $\mathcal{D}^{n-1}$ имеет спектральный радиус ρ_2, меньший ρ_1. Из соотношений (2.10), (2.12) вытекает, что

$$\eta_{m(n-1)+1} = \rho_1^m\zeta + r_1^m\zeta_{m(n-1)+1}, \quad m = 0, 1, \ldots, \tag{2.13}$$

где r_1 – произвольное число из интервала (ρ_2, ρ_1), $\zeta_{m(n-1)+1} = \mathcal{D}^{m(n-1)}\chi/r_1^m$, $\zeta \in B_1^{n-1}$, $\chi \in B_2^{n-1}$ – компоненты разложения вектора $\eta_1 = \xi_\infty - \xi_1$ по подпространствам B_1^{n-1}, B_2^{n-1}.

Далее, поскольку $\rho_2 < r_1$, то $\zeta_{m(n-1)+1} \longrightarrow 0$ при $m \longrightarrow \infty$. Кроме того, так как $\eta_{m(n-1)+1} \in K^{n-1}$, то из соотношения (2.13) следует, что $\zeta \in K_+^{n-1}$. Заметим, что ζ – собственный вектор оператора $\mathcal{D}$. Действительно, из соотношений $\mathcal{D}^{n-1}(\mathcal{D}\zeta) = \mathcal{D}(\mathcal{D}^{n-1}\zeta) = \rho_1\mathcal{D}\zeta$ вытекает, что $\mathcal{D}\zeta \in B_1^{n-1}$. Так как $\zeta \in K_+^{n-1}$, то $0 \ne \mathcal{D}\zeta \in K^{n-1}$, следовательно, $\mathcal{D}\zeta = \rho\zeta$, где $\rho = \rho_1^{1/(n-1)}$.

Полагая $r = r_1^{1/(n-1)}$, $\zeta_k = \mathcal{D}^{k-1}\chi/r^{k-1}$, получаем утверждение леммы. Лемма доказана.

Доказательство теоремы. Полагая в формулах (2.2), (2.3), что правая часть взята из соотношения (2.11), получаем разложение (2.1). Теорема доказана.

3. ФОРМУЛЫ УТОЧНЕНИЯ

Перейдем к уточнению найденного приближения a_k (для c_k рассуждения аналогичны). Разложив $\mathbb{a}_{k-1}$ и $\mathbb{a}_k$ по формуле (2.1), нетрудно установить, что

$$\mathbb{a}_k - \rho\mathbb{a}_{k-1} = (1-\rho)\mathbb{a}_\infty + r^k\mathbb{u}_k - \rho r^{k-1}\mathbb{u}_{k-1}.$$

Следовательно, вектор-функция $\mathbb{a}'_k = (\mathbb{a}_k - \rho\mathbb{a}_{k-1})/(1-\rho)$ аппроксимирует $\mathbb{a}_\infty$ с точностью $O(r^k)$. Поскольку, в силу (2.1), вектор-функции $\mathbb{a}_{k-1}$ и $\mathbb{a}_k$ аппроксимируют $\mathbb{a}_\infty$ с точностью $O(\rho^k)$ и $r < \rho$, то $\mathbb{a}'_k$ аппроксимирует $\mathbb{a}_\infty$ точнее, чем приближения $\mathbb{a}_{k-1}$, $\mathbb{a}_k$, взятые по отдельности.

Непосредственное вычисление $\mathbb{a}'_k$ затруднено, поскольку точное значение ρ, вообще говоря, неизвестно. Для приближенного вычисления ρ используем соотношение $\mathbb{a}_k - \mathbb{a}_{k-1} = \rho(\mathbb{a}_{k-1} - \mathbb{a}_{k-2}) + \mathbb{e}_k$, где $\|\mathbb{e}_k\| = O(r^k)$, вытекающее из разложения (2.1). Следовательно, в качестве приближенного значения ρ могут быть взяты, например, значения

$$\rho_k = \frac{\|\mathbb{a}_k - \mathbb{a}_{k-1}\|}{\|\mathbb{a}_{k-1} - \mathbb{a}_{k-2}\|}, \quad \rho_k = \frac{g(\mathbb{a}_k - \mathbb{a}_{k-1})}{g(\mathbb{a}_{k-1} - \mathbb{a}_{k-2})}, \tag{3.1}$$

где g – произвольный ограниченный линейный функционал, заданный на пространстве $C(\Pi)^n$ (отметим, что хранить значения вектор-функции $\mathbb{a}_{k-2}$ необязательно, поскольку в (3.1) используются только значения соответствующих норм либо функционалов).

Таким образом, приходим к следующим формулам уточнения:

$$\mathbb{a}^*_k = \frac{\mathbb{a}_k - \rho_k\mathbb{a}_{k-1}}{1-\rho_k}, \quad \mathbb{c}^*_k = \frac{\mathbb{c}_k - \rho_k\mathbb{c}_{k-1}}{1-\rho_k}, \tag{3.2}$$

где значение ρ_k определено по одной из формул (3.1). Нетрудно показать, что $\|\mathbb{a}^*_k - \mathbb{a}_\infty\| = O(r^k)$, $\|\mathbb{c}^*_k - \mathbb{c}_\infty\| = O(r^k)$, следовательно, вектор-функция $\mathbb{a}^*_k$ (соответственно, $\mathbb{c}^*_k$) аппроксимирует $\mathbb{a}_\infty$ ($\mathbb{c}_\infty$) точнее, чем приближения $\mathbb{a}_{k-1}$, $\mathbb{a}_k$ ($\mathbb{c}_{k-1}$, $\mathbb{c}_k$), взятые по отдельности.

Продемонстрируем эффективность формул уточнения (3.1), (3.2) на примере математической модели (1.1), (1.2) с параметрами $n = 2$, $l = 3$, $T = 4$, описывающей, в частности, процесс поглощения из водного потока фенола с низкой входной концентрацией активным углем КАД в каскаде, состоящем из двух сорбционных аппаратов. Для приближенного вычисления вектор-функций $\mathbb{a}_k$, $\mathbb{c}_k$ была использована конечно-разностная схема второго порядка аппроксимации по x и t (см., например, [3, с. 141]). В качестве предельных вектор-функций $\mathbb{a}_\infty$, $\mathbb{c}_\infty$ были взяты сеточные вектор-функции $\mathbb{a}_{20}$, $\mathbb{c}_{20}$ (ошибка вычисления $\mathbb{a}_\infty$, $\mathbb{c}_\infty$ в узлах сетки составила 10^{-6}). Сеточные вектор-функции $\mathbb{a}^*_k$, $\mathbb{c}^*_k$ вычислялись по формулам уточнения (3.2) с ρ_k, вычисленным по первой формуле (3.1).

Для сравнительного анализа процессов приближения вектор-функций $\mathbb{a}_k$ и $\mathbb{a}^*_k$ (соответственно, $\mathbb{c}_k$ и $\mathbb{c}^*_k$) к предельной вектор-функции $\mathbb{a}_\infty$ ($\mathbb{c}_\infty$) были вычислены для $k = 3, \ldots, 6$ величины

Таблица

Отклонения \ k	3	4	5	6
δa_k	0.12	5.1×10^{-2}	2.2×10^{-2}	9.2×10^{-3}
δa^*_k	5.2×10^{-2}	1.0×10^{-3}	2.9×10^{-5}	1.3×10^{-6}
δc_k	0.11	4.8×10^{-2}	2.0×10^{-2}	8.5×10^{-3}
δc^*_k	4.8×10^{-2}	9.4×10^{-4}	2.7×10^{-5}	1.1×10^{-6}

отклонений:

$$\delta\mathbf{a}_k = \|\mathbf{a}_k - \mathbf{a}_\infty\|, \quad \delta\mathbf{a}_k^* = \|\mathbf{a}_k^* - \mathbf{a}_\infty\|, \quad \delta\mathbf{c}_k = \|\mathbf{c}_k - \mathbf{c}_\infty\|, \quad \delta\mathbf{c}_k^* = \|\mathbf{c}_k^* - \mathbf{c}_\infty\|$$

(здесь $\|u\|$ – сеточная норма, равная максимальному по модулю значению сеточной функции u). Полученные результаты, представленные в таблице, указывают на возможность применения и эффективность формул уточнения уже на начальных циклах.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Когановский А.М., Клименко Н.А., Левченко Т.М. и др.* Очистка и использование сточных вод в промышленном водоснабжении. М.: Химия, 1983.
2. *Тихонов А.Н., Самарский А.А.* Уравнения математической физики. М.: Наука, 1977.
3. *Веницианов Е.В., Рубинштейн Р.Н.* Динамика сорбции из жидких сред. М.: Наука, 1983.
4. *Денисов А.М., Лукшин А.В.* Математические модели однокомпонентной динамики сорбции. М.: Изд-во МГУ, 1989.
5. *Туйкина С.Р.* Определение коэффициентов сорбции решением обратной задачи // Матем. моделирование. 1997. Т. 9. № 8. С. 96–104.
6. *Chen J.W., Cunningham R.L., Buege J.A.* Computer simulation of plantscale multicolumn adsorption processes under periodic counter-current operation // Ind. Engng Chem. Proc. Design Development. 1972. V. 11. № 3. P. 430–436.
7. *Svedberg G.* Numerical solution of multicomponent adsorption process under periodic counter-current operation // Chem. Engng Sci. 1976. V. 31. № 5. P. 345–354.
8. *Sung E., Han C.D., Rhee H.* Optimal design of multistage adsorption-bed systems // AIChE Journal. 1979. V. 25. № 1. P. 87–100.
9. *Рода И.Г., Жук П.Ф.* Расчет каскада аппаратов с неподвижным слоем при произвольных изотермах сорцбии // Химия и технология воды. 1989. Т. 11. № 6. С. 552–554.
10. *Бондаренко Л.Н.* Математическая модель каскада сорбционных аппаратов // Матем. моделирование. 1997. Т. 9. № 11. С. 23–32.
11. *Красносельский М.А., Вайникко Г.М., Забрейко П.П. и др.* Приближенное решение операторных уравнений. М.: Наука, 1969.
12. *Бондаренко Л.Н.* Решение линейной математической модели каскада последовательно соединенных сорбционных аппаратов // Матем. моделирование. 1999. Т. 11. № 7. С. 55–63.
13. *Красносельский М.А.* Положительные решения операторных уравнений. М.: Физматгиз, 1962.