С.Р. Туйкина

ОБРАТНЫЕ ЗАДАЧИ ДЛЯ ОДНОЙ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ РЕДОКС-СОРБЦИИ*

В химических технологиях широко используются избирательные сорбенты в виде ионитов, адсорбционных редокситов, которые способны соответственно к обмену ионами и окислительно-восстановительным реакциям в контакте с жидкими и газообразными химическими системами. Для описания ионообменных и сорбционных процессов в колоннах используют математические модели, учитывающие различные типы кинетик, продольную диффузию, окислительно–восстановительные реакции [1-3]. Для оценки эффективности сорбционной системы требуется знание динамических параметров этих моделей (коэффициентов кинетики, диффузии и скорости окислительно-восстановительной реакции, изотермы сорбции). Эти коэффициенты определяются из решения обратных задач по экспериментальным выходным концентрационным кривым. Методам решения обратных задач посвящены, например, работы [6, 7], единственность решения этих обратных задач исследуется, например, в работах [4-6].

В данной работе рассмотрена математическая модель сорбции, учитывающую внешнедиффузионную кинетику и окислительно-восстановительную реакцию [2, 3]. Для этой модели будут изучены две обратные задачи, исследована единственность решения, предложены методы их численного решения.

Математическая модель редокс-сорбции

Рассмотрим математическую модель сорбции, учитывающую внешнедиффузионную кинетику и окислительно-восстановительную реакцию

$$vu_x + a_t + w_t = 0,\ (x,t) \in Q_T, \tag{1}$$

$$a_t = \beta(u - \psi(a)), (x,t) \in Q_T, \tag{2}$$

$$w_t = k(w)a, (x,t) \in Q_T, \tag{3}$$

$$u(0,t) = \mu(t), 0 < t \le T, \tag{4}$$

$$a(x,0) = 0,\ w(x,0) = 0, 0 \le x \le l. \tag{5}$$

---

* Работа выполнена при поддержке Российского Фонда Фундаментальных Исследований (код проекта 05-01-00232)

Здесь $u(x,t), a(x,t), w(x,t)$ – концентрации сорбата-окислителя в растворе, в порах сорбента и прореагировавшего сорбата, $\psi(\xi)$ – функция обратная изотерме сорбции, $k(\xi)$ – коэффициент скорости окислительно-восстановительной реакции, $\mu(t)$ – входная концентрация, ν, β – это скорость потока и коэффициент внешнедиффузионной кинетики, $Q_T = \{ (x,t): 0 \le x \le l,\ 0 < t \le T\}$.

Функции $\mu(t)$, $\psi(\xi)$, $k(\xi)$ удовлетворяют следующим условиям

$$\mu(t) \in C^1[0,T],\ \mu(0) = 0,\ \mu'(t) > 0,\ t \in [0,T], \tag{6}$$

$$\psi(\xi) \in C^1(-\infty,\infty),\ \psi(0) = 0,\ \psi(\infty) > \mu(T),\ 0 < \psi'(\xi) \le C_1, \xi \in (-\infty,\infty) \tag{7}$$

$$\kappa(\xi) \in C^1(-\infty,\infty),\ \ 0 < k(0) < \beta\psi'(0), -C_2 < k'(\xi) \le 0, \xi \in (-\infty,\infty) \tag{8}$$

где C_1, C_2 – положительные постоянные.

При выполнении этих условий аналогично работам [4,5] доказывается существование и единственность решения задачи (1)-(5) $\{u(x,t), a(x,t), w(x,t)\} \in C^1[Q_T]\}$ такого, что

$$0 \le u(x,t) \le \mu(t),\ 0 \le a(x,t) \le \psi^{-1}(\mu(t)),$$

$$u_t(x,t) > 0,\ a_t(x,t) > 0,\ w_t(x,t) > 0,\ .$$

$$u_x(x,t) < 0, a_x(x,t) < 0,\ (x,t) \in Q_T$$

Постановка и единственность решения обратных задач

Будем рассматривать следующую обратную задачу.

Задача 1. Известны функции $\mu(t)$, $k(\xi)$ и функция

$$f(t) = u(l,t),\ t \in [0,T], \tag{9}$$

определить $\psi(\xi)$, $u(x,t)$, $a(x,t)$, $w(x,t)$, удовлетворяющие (1)-(5), (9).

Решением обратной задачи (1)-(5), (9) назовем функции $\psi(\xi)$, $u(x,t)$, $a(x,t)$,удовлетворяющие (1)-(5), (9) такие, что $\psi(\xi)$ удовлетворяет (7) $u, a, w \in C^1[Q_T]$.

Для обратной задачи (1)-(5), (9) докажем методом, предложенным в работе [4], теорему единственности.

Теорема 1. Если $\{\psi_i(\xi), u_i(x,t), a_i(x,t), w_i(x,t)\}, i = 1,2$ решения обратной задачи (1)-(5), (9), $\mu(t), k(\xi)$ удовлетворяют (6), (8) и существует $\xi_0 > 0$, такое, что $\psi_1(\xi) = \psi_2(\xi)$ для $\xi \in [0,\xi_0]$, то $\psi_1(\xi) = \psi_2(\xi)$ для $\xi \in [0, a_1(0,T)]$, $u_1(x,t) = u_2(x,t)$, $a_1(x,t) = a_2(x,t), w_1(x,t) = w_2(x,t)$ в Q_T.

Доказательство. Функции $v(x,t)=u_1(x,t)-u_2(x,t)$, $z(x,t)=a_1(x,t)-a_2(x,t)$, $y(x,t)=w_1(x,t)-w_2(x,t)$ являются решением задачи

$$\nu v_x + z_t + y_t = 0, (x,t)\in Q_T, \tag{10}$$

$$z_t = \beta(v - f(a_1) - pz), (x,t)\in Q_T, \tag{11}$$

$$y_t = k(w_1)z + ga_2 y, (x,t)\in Q_T, \tag{12}$$

$$v(0,t)=0,\ 0\le t\le T, \tag{13}$$

$$z(x,0)=0,\ y(x,0)=0, 0\le x\le l, \tag{14}$$

где $f(\xi)=\psi_1(\xi)-\psi_2(\xi)$, $p(x,t)=\int\limits_0^1 \psi_2{}'(a_2(x,t)+\theta(a_1(x,t)-a_2(x,t)))d\theta$,

$$g(x,t)=\int\limits_0^1 k'(w_2(x,t)+\theta(w_1(x,t)-w_2(x,t)))d\theta .$$

Из (10)-(14) получим интегральное уравнение

$$v(x,t)=F(x,t)+\int\limits_0^x\int\limits_0^t K(x,\xi,t,\tau)v(\xi,\tau)d\tau d\xi , \tag{15}$$

где

$$F(x,t)=\int\limits_0^x m(x,\xi)f(a_1(\xi,t))d\xi - \int\limits_0^x\int\limits_0^t m(x,\xi)q(\xi,t,\tau)f(a_1(\xi,\tau))d\tau d\xi ,$$

$$K(x,\xi,t,\tau)=m(x,\xi)q(\xi,t,\tau),\ m(x,\xi)=\frac{\beta}{\nu}\exp\{-\frac{\beta}{\nu}(x-\xi)\},$$

$$q(\xi,t,\tau)=(\beta\, p(\xi,t)-k(w_1(x,t))-$$

$$-g(\xi,t)a_2(\xi,t)\int\limits_\tau^t k(w_1(\xi,\eta))\exp\{\int\limits_\eta^t a_2(\xi,\theta)g(\xi,\theta)d\theta\}d\eta)\exp\{-\beta\int\limits_\tau^t p(\xi,\theta)d\theta\}$$

Разрешив уравнение (15), получим

$$v(x,t)=F(x,t)+\int\limits_0^x\int\limits_0^t R(x,\xi,t,\tau)F(\xi,\tau)d\tau d\xi , \tag{16}$$

где резольвента $R(x,\xi,t,\tau)$ неотрицательна, непрерывна и имеет непрерывные первые частные производные при $0\le\xi\le x\le l, 0\le\tau\le t\le T$.

Введем обозначения

$$Q(x,\xi,t,\tau) = -K(x,\xi,t,\tau) + \int_{\xi}^{x} R(x,\eta,t,\tau)m(\eta,\xi)d\eta -$$

$$-\int_{\xi}^{x}\int_{\tau}^{t} R(x,\eta,t,\theta)K(\eta,\xi,\theta,\tau)d\theta d\eta$$

и пусть T_0 корень уравнения $a_1(0,T_0)=\xi_0$. Учитывая, что $f(\xi)=0$ для $\xi\in[0,\xi_0]$ получим уравнение для $t\in(0,T]$

$$\int_0^l m(l,\xi)f(a_1(\xi,t))d\xi + \int_0^l\int_{t_0}^t Q(l,\xi,t,\tau)f(a_1(\xi,t))d\tau\, d\xi = 0. \qquad (17)$$

Уравнение (17) тогда можно записать в виде

$$\int_{T_0}^{t}\int_{a_1(l,\tau)}^{a_1(0,\tau)} \frac{Q(l,y(v,\tau),t,\tau)}{a_{1x}(y(v,\tau),\tau)} f(v)dvd\tau + \int_{a_1(l,t)}^{a_1(0,t)} \frac{m(l,y(v,t))}{a_{1x}(y(v,t),t)} f(v)dv = 0$$

где $y(v,t)$ функция обратная $a_1(\xi,t), v=a_1(\xi,t)$. Пусть T_1 корень уравнения $a_1(l,t)=a_1(0,T_0)$ при $a_1(l,T)>\xi_0$ или $T_1=T$ при $a_1(l,T)\le\xi_0$, тогда при $t\in[T_0,T_1]$, поменяв порядок интегрирования, получим уравнение

$$\int_{\xi_0}^{\omega(t)}\Big(\int_{\omega^{-1}(v)}^{t} K_1(v,t,\tau)d\tau + K_2(v,t)\Big)f(v)dv = 0,$$

где $\omega(t)=a_1(l,t), K_1(v,t,\tau)=\dfrac{Q(l,y(v,\tau),t,\tau)}{a_{1x}(y(v,\tau),\tau)}, K_2(v,t)=\dfrac{m(l,y(v,t)t)}{a_{1x}(y(v,t),t)}$.

Введем новую переменную $\xi=\omega(t)$, тогда $t=\omega^{-1}(\xi)$, и обозначим $G(v,\theta)=\int_{\omega^{-1}(v)}^{\omega^{-1}(\theta)} K_1(v,\omega^{-1}(\theta),\tau)d\tau + K_2(v,\omega^{-1}(\theta))$, $\quad \xi_1=\omega(T_1)$. Тогда последнее уравнение преобразуем к виду

$$\int_{\xi_0}^{\xi} G(v,\xi)f(v)dv = 0, \xi\in[\xi_0,\xi_1].$$

Продифференцировав по ξ, получим интегральное уравнение Вольтерра 2 рода

$$H(\xi,\xi)f(\xi) + \int_{\xi_0}^{\xi} H_{\xi}(v,\xi)f(v)dv = 0, \xi\in[\xi_0,\xi_1].$$

Следовательно, $f(\xi)=0$ для $\xi\in[\xi_0,\xi_1]$. Повторяя этот процесс конечное число раз, получим $f(\xi)=0$ для $\xi\in[0,a_1(0,T)]$. Тогда $u_1(x,t)=u_2(x,t), a_1(x,t)=a_2(x,t), w_1(x,t)=w_2(x,t)$ в Q_T. Теорема доказана.

Задача 2. Известны функции $\mu(t),\psi(\xi)$ и функция $f(t)$, удовлетворяющая (9) определить $k(\xi), u(x,t), a(x,t), w(x,t)$, удовлетворяющие (1)-(5), (9).

Решением обратной задачи (1)-(5), (9) назовем функции $k(\xi)$, $u(x,t)$, $a(x,t), w(x,t)$, удовлетворяющие (1)-(5),(9) такие, что $k(\xi)$ удовлетворяет (8) $u,a,w\in C^1[Q_T]$.

Для обратной задачи (1)-(5), (9) справедлива теорема единственности.

Теорема 2. Если $\{k_i(\xi), u_i(x,t), a_i(x,t), w_i(x,t)\}$, $i=1,2$ решения обратной задачи (1)-(5), (9), $\mu(t),\psi(\xi)$ удовлетворяют (6),(7) и существует $\xi_0>0$, такое, что $k_1(\xi)=k_2(\xi)$ для $\xi\in[0,\xi_0]$, то $k_1(\xi)=k_2(\xi)$ для $\xi\in[0,a_1(0,T)]$, $u_1(x,t)=u_2(x,t)$, $a_1(x,t)=a_2(x,t), w_1(x,t)=w_2(x,t)$ в Q_T.

Доказательство. Функции $v(x,t)=u_1(x,t)-u_2(x,t)$, $z(x,t)=a_1(x,t)-a_2(x,t)$, $y(x,t)=w_1(x,t)-w_2(x,t)$ являются решением задачи

$$v v_x + z_t + y_t = 0, (x,t)\in Q_T, \tag{18}$$

$$z_t = \beta(v-pz), (x,t)\in Q_T, \tag{19}$$

$$y_t = k_1(w_1)z + b(w_1)a_2 + ga_2 y, (x,t)\in Q_T, \tag{20}$$

$$v(0,t)=0, 0\le t\le T, \tag{21}$$

$$z(x,0)=0, y(x,0)=0, 0\le x\le l, \tag{22}$$

где $b(\xi)=k_1(\xi)-k_2(\xi)$, $p(x,t)=\int_0^1 \psi'(a_2(x,t)+\theta(a_1(x,t)-a_2(x,t)))d\theta$,

$$g(x,t)=\int_0^1 k_2'(w_2(x,t)+\theta(w_1(x,t)-w_2(x,t)))d\theta.$$

Из (18)-(22) получим интегральное уравнение

$$v(x,t)=F(x,t)+\int_0^x\int_0^t K(x,\xi,t,\tau)v(\xi,\tau)d\tau d\xi, \tag{23}$$

где

$$F(x,t) = -\int_0^x m(x,\xi) b(w_1(\xi,t)) a_2(\xi,t) d\xi -$$

$$-\int_0^x\int_0^t m(x,\xi) g(\xi,t) a_2(\xi,t) \exp\{\int_\tau^t a_2(\xi,\theta) g(\xi,\theta) d\theta\} b(w_1(\xi,\tau)) d\tau d\xi ,$$

$$K(x,\xi,t,\tau) = \beta m(x,\xi) q(\xi,t,\tau), \; m(x,\xi) = \exp\{-\frac{\beta}{\nu}(x-\xi)\}/\nu,$$

$$q(\xi,t,\tau) = (\beta p(\xi,t) - k_1(w_1(x,t)) -$$

$$-g(\xi,t) a_2(\xi,t) \int_\tau^t k_1(w_1(\xi,\eta)) \exp\{\int_\eta^t a_2(\xi,\theta) g(\xi,\theta) d\theta\} d\eta) \exp\{-\beta \int_\tau^t p(\xi,\theta) d\theta\}$$

Разрешив уравнение (23), получим

$$v(x,t) = F(x,t) + \int_0^x\int_0^t R(x,\xi,t,\tau) F(\xi,\tau) d\tau d\xi ,$$

где резольвента $R(x,\xi,t,\tau)$ неотрицательна, непрерывна и имеет непрерывные первые частные производные при $0 \le \xi \le x \le l, 0 \le \tau \le t \le T$. Аналогично теореме 1 последнее уравнение преобразуем к виду

$$\int_{\xi_0}^{\xi} L(\nu,\xi) b(\nu) d\nu = 0, \xi \in [\xi_0, \xi_1],$$

где T_1 корень уравнения $a_1(l,t) = a_1(0,T_0)$ при $a_1(l,T) > \xi_0$ или $T_1 = T$ при $\xi_1 = \omega(T_1), a_1(l,T_1) = \xi_1$.

Продифференцировав по ξ, получим интегральное уравнение Вольтерра 2 рода

$$L(\xi,\xi) b(\xi) + \int_{\xi_0}^{\xi} L_\xi(\nu,\xi) b(\nu) d\nu = 0, \xi \in [\xi_0, \xi_1].$$

Следовательно, $b(\xi) = 0$ для $\xi \in [\xi_0, \xi_1]$. Повторяя этот процесс конечное число раз, получим $b(\xi) = 0$ для $\xi \in [0, a_1(0,T)]$. Тогда $u_1(x,t) = u_2(x,t), a_1(x,t) = a_2(x,t), w_1(x,t) = w_2(x,t)$ в Q_T. Теорема доказана.

Численный метод решения обратных задач

Предположим, что $\psi(\xi,\lambda) \in C^{1,1}[G]$, $G = (-\infty,\infty) \times Q_N$, Q_N – компакт в R^N. Тогда при известных функциях $k(\xi), \mu(t)$ задача (1)-(5) определяет оператор $A\lambda = f(t)$. Пусть дополнительная информация $f(t)$ задана с погрешностью δ, т.е. известна функция $f_\delta(t)$ такая, что

$$\| f_\delta(t) - f(t) \|_{L_2[0,T]} \le \delta .$$

Будем минимизировать невязку

$$S(\lambda) = \|A\lambda - f_\delta(t)\|^2_{L_2[0,T]} = \int_0^T (u(l,t,\lambda) - f_\delta(t))^2 dt$$

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

$$S_\lambda = \int_0^T\int_0^l \beta\psi_\lambda(a(x,t))(\alpha(x,t) - \eta(x,t))dxdt,$$

где $\alpha(x,t), \eta(x,t)$ – решения сопряженной задачи

$$v\alpha_x + \beta(-\alpha + \eta) = 0, 0 \le x < l, 0 \le t < T,$$

$$\eta_t + \beta\psi'_a(\alpha - \eta) + k(\rho - \alpha) = 0, 0 \le x \le l, 0 \le t < T,$$

$$\rho_t + k'_w a(\rho - \alpha) = 0, 0 \le x \le l, 0 \le t < T,$$

$$v\alpha(l,t) = 2(u(l,t,\lambda) - f_\delta(t)), 0 \le t < T,$$

$$\eta(x,T) = 0, \rho(x,T) = 0\ 0 \le x \le l.$$

Функцию $\psi(\xi,\lambda)$ будем искать в виде многочлена Бернштейна

$$\psi(\xi,\lambda) = \sum_{k=0}^N \lambda_k C_N^k \xi^k (1-\xi)^{N-k}.$$

Схема вычислительного эксперимента состояла в следующем. Для известных функций $\mu(t), k(\xi), \psi(\xi)$ решалась задача (1)-(5) и определялась $f(t) = u(l,t),$. Затем функция $f(t)$ возмущалась

$f_\delta(t) = f(t) + \delta\, s(t)$, где $s(t)$ случайная величина, равномерно распределенная на $[-1,1], \delta = 0.02$ – погрешность эксперимента. Функции $f_\delta(t)$ использовались как исходная информация для решения обратных задач 1, 2 предложенными методами. Были взяты функции $k(\xi) = 1 - 0.5\xi$, $\mu(t) = 1 - (t - 0{,}8)^2 / 0.64$ для $t \le 0.8$ и $\mu(t) = 1$ для $t > 0.8$. Число параметров в многочлене Бернштейна равно *N=8*. На рис.1 приведены результаты восстановления функции $\psi(\xi) = \dfrac{\xi}{5 - 4\xi}$. Начальное приближение имело следующий вид $\psi(\xi) = \xi$. Кривая 1 соответствует точным данным, 2- восстановленным градиентным методом для задачи 1, 3 – начальное приближение.

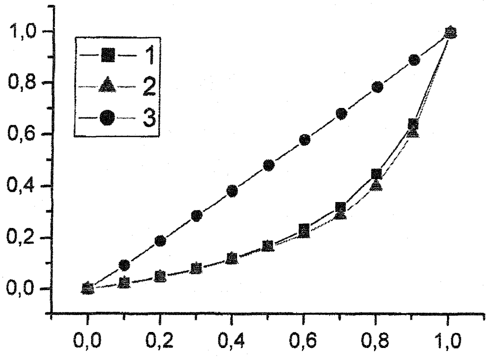

Рис. 1

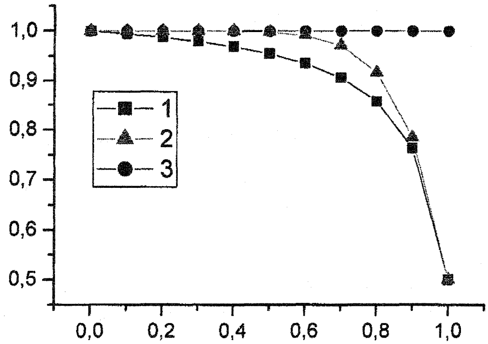

Рис. 2

Аналогично градиентным методом решалась задача 2, где градиент имеет вид $S_\lambda = \int\limits_0^T \int\limits_0^l k_\lambda(w(x,t))(\rho(x,t) - \alpha(x,t))dxdt,$

где $\alpha(x,t), \rho(x,t)$ – решения той же сопряженной задачи.

На рис.2 приведены результаты восстановления функции $k(\xi) = 1 - 0.5\xi/(10 - 9\xi)$, если $\psi(\xi) = \dfrac{\xi}{2-\xi}$, а $\mu(t)$ взята такой же как в задаче 1. Кривая 1 соответствует точным данным, 2 – восстановленным, 3 – начальное приближение. Приведенные результаты показывают эффективность предложенного алгоритма решения этой обратной задачи.

Литература

1. Венецианов Е.В., Рубинштейн Р.Н. Динамика сорбции из жидких сред. М.: Наука, 1983.
2. Кравченко Т.А., Николаев Н.И. Кинетика и динамика процессов в редокситах. М.: Химия, 1982.
3. Кафаров В.В. Методы кибернетики в химии и химической технологии. М.: Химия, 1976.
4. 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.
5. Денисов А.М. Единственность решения задачи определения нелинейного коэффициента системы уравнений в частных производных в малом и целом// Сибирский матем. журнал. 1995.Т.36. №1. С.60-71.
6. Туйкина С.Р. Обратные задачи для одной математической модели ионообмена в случае сжимаемости ионита // Прикладная математика и информатика.М.:Макс Пресс. 2001. №7. С.73-81.
7. Туйкина С.Р. Численные методы решения некоторых обратных задач динамики сорбции // Вестн. Моск. ун-та. Сер. 15. Вычисл. матем. и киберн.1998. №4. С.16-19.