Туйкина С.Р.

ОБРАТНЫЕ ЗАДАЧИ ДЛЯ ОДНОЙ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ИОНООБМЕНА В СЛУЧАЕ СЖИМАЕМОСТИ ИОНИТА. [1]

Для описания ионообменных и сорбционных процессов в колоннах используют математические модели, учитывающие различные типы кинетик, продольную диффузию, различные типы изотерм [1-3]. Знание динамических параметров этих моделей (кинетические коэффициенты, коэффициенты диффузии), изотермы ионообмена необходимо для оценки эффективности колонны и ионообменной системы. Эти коэффициенты определяются из решения обратных задач по экспериментальным выходным концентрационным кривым. Методам решения обратных задач посвящены, например, работы [2, 4, 7], единственность решения этих обратных задач исследуется, например, в работах [4-6].

В данной работе мы рассмотрим математическую модель ионообмена, учитывающую сжимаемость ионита в процессе ионообмена [2,3]. Для этой модели будут изучены две обратные задачи, исследована единственность решения, предложены методы их численного решения.

1. Математическая модель ионообмена

Рассмотрим математическую модель ионообмена, учитывающую внешнедиффузионную кинетику

$$u_y + a_t = 0,\ 0 \le y \le d(t),\ 0 < t \le T, \tag{1}$$

$$a_t = u - \psi(a),\ 0 \le y \le d(t),\ 0 < t \le T, \tag{2}$$

$$u(0,t) = \mu(t),\ 0 < t \le T, \tag{3}$$

$$a(y,0) = 0,\ 0 \le y \le d(0). \tag{4}$$

Здесь $u(y,t), a(y,t)$ - концентрации ионов в растворе и ионите, $\psi(\xi)$ - функция обратная изотерме ионообмена, $\mu(t)$ - входная концентрация, $d(t)$ -

[1] Работа выполнена при поддержке Российского Фонда Фундаментальных Исследований (код проекта 99-01-00837)

длина ионита, которая может меняться , поскольку ионит может сжиматься или разбухать при изменении концентрации a.

Вместо эйлеровой координаты y, связанной со стенкой колонны введем координату x, связанную с частицами ионита. В новых координатах длина слоя ионита постоянна $y = l(a)x$, $u_x = l(a)u_y$. Тогда

$$u_x + l(a)(u - \psi(a)) = 0, \ (x,t) \in Q_T, \tag{5}$$

$$a_t = u - \psi(a), \ (x,t) \in Q_T, \tag{6}$$

$$u(0,t) = \mu(t), \ 0 < t \le T, \tag{7}$$

$$a(x,0) = 0, \ 0 \le x \le 1, \tag{8}$$

где $Q_T = \{(x,t), \ 0 \le x \le 1, \ 0 \le t \le T\}$.

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

$$\mu(t) \in C^4[0,T], \ \mu(0) = 0, \ \mu'(t) > 0, \ t \in [0,T], \tag{9}$$

$$\psi(\xi) \in C^1(-\infty,\infty), \ \psi(0) = 0, \ \psi(\infty) > \mu(T), \ 0 < \psi'(\xi) \le C_1, \xi \in (-\infty,\infty) \tag{10}$$

$$l(\xi) \in C^1(-\infty,\infty), \ l(0) = d(0), \ 0 < l(\xi) < d(0), \ C_2 < l'(\xi) \le 0, \xi \in (-\infty,\infty) \tag{11}$$

где C_1, C_2 - положительные постоянные.

При выполнении этих условий аналогично работам [4,5] доказывается, что существует единственное решение задачи (5)-(8) $\{u(x,t), a(x,t)\} \in C^1[Q_T]\}$ такое, что

$$0 \le u(x,t) \le \mu(t), \ 0 \le a(x,t) \le \psi^{-1}(\mu(\tau)), \ (x,t) \in Q_\tau,$$
$$u_t(x,t) > 0, \ a_t(x,t) > 0, \ a_x(x,t) < 0, \ 0 \le x \le 1, \ 0 < t \le T.$$

Дополнительно предположим, что

$$\psi(\xi) \in C^4[0, \psi^{-1}(\mu(T)], \ l(\xi) \in C^4[0, \psi^{-1}(\mu(T)], \tag{12}$$

тогда решение задачи (5)-(8) принадлежит $C^4[Q_T]$.

2. Постановка и единственность решения обратной задачи

Будем рассматривать следующую обратную задачу.

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

$$f(t) = u(1,t), \ t \in [0,T], \tag{13}$$

определить $l(\xi)$, $u(x,t)$, $a(x,t)$, удовлетворяющие (5)-(8), (13).

Решением обратной задачи (5)-(8), (13) назовем функции $l(\xi)$, $u(x,t)$, $a(x,t)$, удовлетворяющие (5)-(8),(13) такие, что $l(\xi)$ удовлетворяет (11),(12), $u,a \in C^4[Q_T]$.

Для обратной задачи (5)-(8), (13) докажем методом, предложенным в работах [5, 6], теорему единственности.

Теорема. *Если* $\{l_i(\xi),\ u_i(x,t),\ a_i(x,t)\}$, $i=1,2$ решения обратной задачи (5)-(8), (13) и $\mu(t),\psi(\xi)$ удовлетворяют (9),(10),(12), то $l_1(\xi)=l_2(\xi)$ для $\xi\in[0,a_1(0,T)]$, $u_1(x,t)=u_2(x,t)$, $a_1(x,t)=a_2(x,t)$ в Q_T.

Доказательство. Функции $z(x,t)=u_1(x,t)-u_2(x,t)$, $w(x,t)=a_1(x,t)-a_2(x,t)$ являются решением задачи

$$z_x+l_1(a_1)z+a_{2t}b(a_1)-H\,w=0,\ (x,t)\in Q_T, \tag{14}$$

$$w_t=z-pw,\ (x,t)\in Q_T, \tag{15}$$

$$z(0,t)=0,\ 0\le t\le T, \tag{16}$$

$$w(x,0)=0,\ 0\le x\le 1, \tag{17}$$

где $b(\xi)=l_1(\xi)-l_2(\xi)$, $p(x,t)=\int\limits_0^1\psi'(a_2(x,t)+\theta(a_2(x,t)-a_1(x,t)))d\theta$,

$$H(x,t)=-a_{2t}(x,t)\int\limits_0^1 l_2'(a_2(x,t)+\theta(a_2(x,t)-a_1(x,t)))d\theta+l_1(a_1(x,t))p(x,t).$$

Из (14)- (17) получим интегральное уравнение

$$z(x,t)=f(x,t)+\int\limits_0^x\int\limits_0^t K(x,\xi,t,\tau)z(\xi,\tau)d\tau d\xi, \tag{18}$$

где

$$f(x,t)=-\int\limits_0^x\exp(-\int\limits_\xi^x l_1(a_1(\eta,t))d\eta)\ a_{2t}(\xi,t)b(a_1(\xi,t))d\xi,$$

$$K(x,\xi,t,\tau)=\exp(-\int\limits_\xi^x l_1(a_1(\eta,t))d\eta-\int\limits_\tau^t p(\xi,\theta)d\theta)H(\xi,t).$$

Разрешив уравнение (18), получим

$$z(x,t)=f(x,t)+\int\limits_0^x\int\limits_0^t R(x,\xi,t,\tau)f(\xi,\tau)d\tau d\xi, \tag{19}$$

где резольвента $R(x,\xi,t,\tau)$ неотрицательна, непрерывна и имеет непрерывные первые частные производные при $0\le\xi\le x\le 1,\ 0\le\tau\le t\le T$.

Введя обозначения $q(\xi,t)=\exp(-\int\limits_\xi^1 l_1(a_1(\eta,t))d\eta)\ a_{2t}(\xi,t)$,

$$Q(\xi,t,\tau)=\int_{\xi}^{1}R(1,\theta,t,\tau)\exp(-\int_{\xi}^{\theta}l_1(a_1(\eta,\tau))d\eta)d\theta\ \ a_{2t}(\xi,\tau)$$

и учитывая (13), получим уравнение для $t\in(0,T]$

$$\int_0^1 q(\xi,t)b(a_1(\xi,t))d\xi+\int_0^1\int_0^t Q(\xi,t,\tau)b(a_1(\xi,t))d\tau\ \ d\xi=0. \qquad (20)$$

Сделав в первом интеграле замену переменных $v=a_1(\xi,t)$, продифференцировав по t и проведя обратную замену переменных, получим

$$q(0,t)b(a_1(0,t))\frac{a_{1t}(0,t)}{a_{1x}(0,t)}=q(1,t)b(a_1(1,t))\frac{a_{1t}(1,t)}{a_{1x}(1,t)}+$$

$$+\int_0^1 Q_1(\xi,t)b(a_1(\xi,t))d\xi+\int_0^t\int_0^1 Q_t(\xi,t,\tau)b(a_1(\xi,\tau))d\xi d\tau,$$

где

$$Q_1(\xi,t)=-q_{\xi}(\xi,t)\frac{a_{1t}(\xi,t)}{a_{1\xi}(\xi,t)}+q_t(\xi,t)+$$

$$+q(\xi,t)[\frac{a_{1xx}(\xi,t)a_{1t}(\xi,t)}{a_{1x}^2(\xi,t)}-\frac{a_{1xt}(\xi,t)}{a_{1x}(\xi,t)}]+Q(\xi,t,t)$$

Введем функцию $\beta(\xi)=b(\xi)\ \ \xi^{-3}$. Из условий (13) и (19) следует, что $l'_1(0)=l'_2(0),\ l''_1(0)=l''_2(0),\ l'''_1(0)=l'''_2(0)$. Тогда $\beta(\xi)\in C[0,a_1(0,T_0)],\ \beta(0)=0$. Функция $\beta(\xi)$ является решением уравнения

$$\beta(a_1(0,t))=P_1(t)\beta(a_1(1,t))+\int_0^1 P_2(\xi,t)\beta(a_1(\xi,t))d\xi+$$

$$+\int_0^t\int_0^1 P_3(\xi,t,\tau)\beta(a_1(\xi,\tau))d\xi d\tau. \qquad (21)$$

Здесь $P_1(t)=\dfrac{q(1,t)}{q(0,t)}\dfrac{a_{1t}(1,t)}{a_{1t}(0,t)}\dfrac{a_{1x}(0,t)}{a_{1x}(1,t)}(\dfrac{a_1(1,t)}{a_1(0,t)})^3$

$$P_2(\xi,t)=\frac{Q_1(\xi,t)}{q(0,t)}\frac{a_{1x}(0,t)}{a_{1t}(0,t)}(\frac{a_1(\xi,t)}{a_1(0,t)})^3,\quad P_3(\xi,t,\tau)=\frac{Q_t(\xi,t,\tau)}{q(0,t)}\frac{a_{1x}(0,t)}{a_{1t}(0,t)}(\frac{a_1(\xi,t)}{a_1(0,t)})^3.$$

Учитывая, что найдется $t_0\in(0,T]$ и положительная постоянная c_0 такие, что для $x\in(0,1),\ t\in(0,t_0)$ выполняются неравенства

$$\left|\frac{a(x,t)}{a(0,t)}-e^{-x}\right|\le c_0t,\ \left|\frac{a_x(0,t)}{a_x(x,t)}-e^{x}\right|\le c_0t,\ \left|\frac{a_t(x,t)}{a_t(0,t)}-e^{-x}\right|\le c_0t,\ \left|\frac{a_{xt}(x,t)}{a_t(0,t)}+e^{-x}\right|\le c_0t$$

$$\left|\frac{a_{xx}(x,t)a_x(0,t)}{a_x^2(x,t)}+e^{x}\right|\le c_0t,\ \left|\frac{a_x(0,t)}{a_t(0,t)}\right|\le c_0t,$$

получим, что для $t\in(0,t_0)$ $P_1(t)=e^{-3}+P_{11}(t)$, $P_2(\xi,t)=e^{-3\xi}+P_{21}(\xi,t)$, где

$$P_{11}(t)\to 0,\ \int_0^1|P_{21}(\xi,t)|d\xi\to 0,\ \int_0^t\int_0^1|P_3(\xi,t,\tau)|d\xi d\tau\to 0 \text{ при } t\to 0.$$

Уравнение (21) преобразуем к виду

$$\beta(a_1(0,t))=e^{-3}\beta(a_1(1,t))+P_{11}(t)\beta(a_1(1,t))+\int_0^1 e^{-3\xi}\beta(a_1(\xi,t))d\xi+$$

$$+\int_0^1 P_{21}(\xi,t)\beta(a_1(\xi,t))d\xi+\int_0^t\int_0^1 P_3(\xi,t,\tau)\beta(a_1(\xi,\tau))d\xi\, d\tau,$$

тогда существует $T_0\in(0,t_0)$ такое, что $\beta(\xi)=0$ для $\xi\in[0,a_1(0,T_0)]$. Из (14)-(17) следует, что $u_1(x,t)=u_2(x,t)$, $a_1(x,t)=a_2(x,t)$ в Q_{lT_0}.

Уравнение (20) тогда можно записать в виде

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

где $y(v,t)$ функция обратная $a_1(\xi,t), v=a_1(\xi,t)$. Пусть T_1 корень уравнения $a_1(1,t)=a_1(0,T_0)=\xi_0$ при $a_1(1,T)>\xi_0$ или $T_1=T$ при $a_1(1,T)\le\xi_0$, тогда при $t\in[T_0,T_1]$,поменяв порядок интегрирования, получим уравнение

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

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

Введем новую переменную $\xi=\omega(t)$, тогда $t=\omega^{-1}(\xi)$, и обозначим

$$H(v,\theta)=\int_{\omega^{-1}(v)}^{\omega^{-1}(\theta)}K_1(v,\omega^{-1}(\theta),\tau)d\tau+K_2(v,\omega^{-1}(\theta)),\ \xi_1=\omega(T_1).$$

Тогда последнее уравнение преобразуем к виду

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

Продифференцировав по ξ, получим интегральное уравнение Вольтерра 2 рода

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

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 $u_1(x,t)=u_2(x,t),\, a_1(x,t)=a_2(x,t)$ в Q_T. Теорема доказана.

3. Численные методы решения обратной задачи 1

Остановимся вначале на дескриптивной регуляризации с градиентным методом. Предположим, что $l(\xi,\lambda)\in C^{1,1}[G]$, $G=(-\infty,\infty)\times Q_N$, Q_N – компакт в R^N. Тогда при известных функциях $\psi(\xi),\mu(t)$ задача (5)-(8) 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

$$S(\lambda)=\|A\lambda-f_\delta(t)\|^2_{L_2[0,T]}=\int_0^T(u(1,t,\lambda)-f_\delta(t))^2dt$$

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

$$S_\lambda=\int_0^T\int_0^1 l_\lambda(a(x,t))(\psi(a(x,t))-u(x,t))\alpha(x,t)dt,$$

где $\alpha(x,t)$ - компонент решения сопряженной задачи

$$\alpha_x-l(a)\alpha+\eta=0,\ 0\le x<1,\ 0\le t<T,$$
$$\eta_t+\psi_a(l\alpha-\eta)-l_a(u-\psi)\alpha=0,\ 0\le x\le 1,\ 0\le t<T,$$
$$\alpha(1,t)=2(u(1,t,\lambda)-f_\delta(t)),\ 0\le t<T,$$
$$\eta(x,T)=0,\ 0\le x\le 1.$$

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

$$l(\xi,\lambda)=\sum_{k=0}^N\lambda_k C_N^k\xi^k(1-\xi)^{N-k},\ \lambda_0=d(0),\lambda_{k+1}\le\lambda_k,\lambda_N>0$$

Остановимся теперь на итерационном методе. Проинтегрировав уравнение (5) по t и x и учитывая (7), (13), получим интегральное соотношение

$$\int_0^T(\mu(\tau)-f(\tau))d\tau=\int_0^1\int_0^{a(\eta,t)}l(\xi)d\xi d\eta \text{ или } G(t)=\int_0^{a(0,t)}K(\xi,t)l(\xi)d\xi, \text{ где}$$

$K(\xi,t)=1$, если $\xi<a(1,t)$ и $K(\xi,t)=a^{-1}(\xi,t)$, если $\xi\ge a(1,t)$

$$G(t)=\int_0^T(\mu(\tau)-f(\tau))d\tau .$$

Построим итерационный процесс для задачи 1 следующим образом: для функции $l^k(\xi)$ решим задачу (5)-(8) и найдем $u^k(x,t),a^k(x,t)$, функцию $l^{k+1}(\xi)$ найдем по формуле

$$l^{k+1}(a^k(0,t))=l^k(a^k(0,t))-\beta(\int_0^{a^k(0,t)}K(\xi,t)l^k(\xi)d\xi-G(t)),\ \beta=const$$

4. Постановка и метод решения обратной задачи 2

Рассмотрим теперь вторую обратную задачу. В качестве дополнительной информации из эксперимента может быть известна не выходная концентрационная кривая $u(1,t)$, а закон движения границы ионита.

Задача 2. Известны функции $\mu(t),\ \psi(\xi)$ и функция

$$d(t)=l(a(1,t)),\ t\in[0,T]. \qquad (22)$$

Требуется определить $l(\xi),\ u(x,t),\ a(x,t)$, удовлетворяющие (1)-(4), (22).

Сделав в (1)-(4) замену $z=\dfrac{y}{d(t)}$, получим задачу

$$u_z+d(t)a_t-d'(t)za_z=0,\ 0<z\le 1,\ 0<t\le T, \qquad (23)$$

$$a_t=\frac{d'(t)}{d(t)}za_z-\psi(a)+u,\ 0\le z\le 1,\ 0<t\le T, \qquad (24)$$

$$u(0,t)=\mu(t), 0<t\le T, \qquad (25)$$

$$a(z,0)=0,\ 0\le z\le 1. \qquad (26)$$

Алгоритм решения обратной задачи 2: зная $d(t)$, решим задачу (23)-(26) и найдем $a(1,t)$, тогда из соотношения (22) однозначно определим $l(\xi),\ \xi\in[0,a(1,T)]$.

5. Численный эксперимент.

Схема вычислительного эксперимента состояла в следующем. Для известных функций $\mu(t),\ \psi(\xi),\ l(\xi)$ решалась задача (5)-(8) и определялась $f(t)=u(1,t)$, либо для задачи 2 $d(t)=l(a(1,t))$. Затем функции $f(t),d(t)$ возмущались

$f_\delta(t) = f(t) + \delta\ s(t)$, $d_\delta(t) = d(t) + \delta\ s(t)$, где $s(t)$ случайная величина, равномерно распределенная на $[-1,1]$, δ=0.02 -погрешность эксперимента.

Функции $f_\delta(t)$, $d_\delta(t)$ использовались как исходная информация для решения обратных задач 1, 2 предложенными методами. Были взяты функции $\psi(\xi) = \xi./(2-\xi)$, $\mu(t) = 1-(t-0,8)^2/0.64$ для $t \le 0.8$ и $\mu(t) = 1$ для $t > 0.8$. Параметры были равны: $T=1$ для задачи 1, $T=3$ для задачи 2, число параметров в многочлене Бернштейна равно $N=8$.

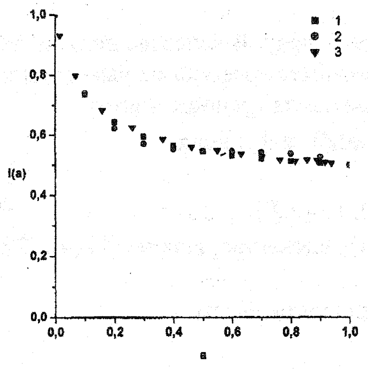

Рис. 1

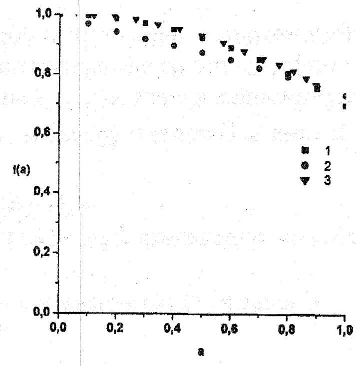

Рис. 2

На рис.1 приведены результаты восстановления функции $l(\xi) = 1 - \dfrac{5\xi}{1+9\xi}$.

Кривая 1 соответствует точным данным, 2 – восстановленным градиентным методом для задачи 1, 3 – восстановленным методом, предложенным для задачи 2. На рис.2 приведены результаты восстановления функции $l(\xi) = 1 - 0.3\xi^2$. Кривая 1 соответствует точным данным, 2 – восстановленным итерационным методом для задачи 1, 3 – восстановленным методом, предложенным для задачи 2. Начальное приближение в градиентном и итерационном методах имело следующий вид $l(\xi) = 1$. 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. Иванов В.А., Николаев Н.П., Горшков В.И. Способ определения динамических параметров противоточных ионообменных колонн//Теоретические основы химической технологии.1992. Т. 26. №1. С.43-49.
3. Тихонов А.Н., Поезд А.Д. Моделирование разделения смеси веществ сорбционным двухтемпературным способом качающейся волны//ЖФХ. 1995. Т.69. №3.С. 496-500.
4. Денисов А.М., Лукшин А.В. Математические модели однокомпонентной динамики сорбции. М.:1989.
5. 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.
6. 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.
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.