С.Р. Туйкина

О ЧИСЛЕННОМ РЕШЕНИИ ОДНОЙ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ ИОНООБМЕНА В СЛУЧАЕ СМЕШАННОЙ КИНЕТИКИ*

Значительный интерес для обработки результатов ионообменных экспериментов представляет развитие математических методов численного решения обратных задач, связанных с определением характеристик этих процессов (изотермы ионообмена, кинетических коэффициентов, коэффициента равновесия) по экспериментальным данным (выходным концентрационным кривым). Ряд таких обратных задач для различных математических моделей ионообмена и динамики сорбции изучен, например, в работах [1-5]. Методы решения таких обратных задач рассмотрены, например, в работах [5-6].

В данной работе для математической модели ионообмена, учитывающей смешанно-диффузионную кинетику ионообмена (двухслойная модель смешанно-диффузионного процесса кинетики) рассматривается обратная задача определения нелинейного коэффициента равновесия в изотерме по выходной динамической кривой. Предлагается метод численного решения в классе функций, представимых в параметрическом виде.

Рассмотрим математическую модель ионообмена в случае смешанно-диффузионной кинетики [7]

$$\varepsilon\overline{u}_\tau + \overline{v}\overline{u}_y + \overline{a}_\tau = 0,\ 0 < y \le l,\ 0 < \tau \le T, \qquad (1)$$

$$\overline{a}_\tau = \overline{\beta}(\overline{u} - \overline{\psi}) = \overline{\gamma}(\overline{\varphi} - \overline{a}),\ 0 \le y \le l,\ 0 < \tau \le T, \qquad (2)$$

$$\overline{\varphi} = \frac{a_\Sigma \overline{\psi}\overline{k}(\overline{a})}{u_\Sigma + (\overline{k}(\overline{a}) - 1)\overline{\psi}} \qquad (3)$$

$$\overline{u}(0,\tau) = \overline{\mu}(\tau),\ 0 < \tau \le T, \qquad (4)$$

$$\overline{u}(y,0) = 0,\ \overline{a}(y,0) = 0,\ 0 \le y \le l. \qquad (5)$$

Здесь (1) – это уравнение массопереноса, где $\overline{u}(y,t)$, $\overline{a}(y,t)$ – концентрации ионов в фазах раствора и внутреннего слоя ионита, ε – пористость ионита, ν – линейная скорость потока. Уравнения (2) – это уравнения кинетики, учитывающие двухслойную модель зерен ионита и условие равенства скоростей изменений концентраций в слоях ионита.

* Работа выполнена при поддержке Российского Фонда Фундаментальных Исследований (код проекта 02-01-0344)

Здесь $\overline{\varphi}$ – концентрация ионов во внешнем слое ионита, $\overline{\psi}$ – концентрация ионов у внешнего слоя ионита, $\overline{\beta},\overline{\gamma}$ – эффективные кинетические коэффициенты массопереноса для внешней и внутренней диффузии ионов в слои ионита. (3) – это уравнение изотермы, которое получается из уравнения равновесия Никольского в случае равенства зарядов ионов $\frac{\overline{\varphi}}{\overline{\psi}}=\overline{k}(\overline{a})\frac{a_\Sigma-\overline{\varphi}}{u_\Sigma-\overline{\psi}}$, $\overline{k}(\overline{a})$ – коэффициент равновесия обмена, a_Σ, u_Σ – суммарные концентрации ионов в ионите и в фазе раствора. Уравнения (4), (5) – это граничные и начальные условия, где $\overline{\mu}(\tau)$ – входная концентрация ионов.

Введем нормировки

$$x=\frac{y}{l}, t=\frac{\tau}{T}, u=\frac{\overline{u}}{u_\Sigma}, a=\frac{\overline{a}}{a_\Sigma}, \Gamma=\frac{a_\Sigma}{u_\Sigma}, \nu=\overline{\nu}\frac{T}{l}, \beta=\frac{\overline{\beta}T}{\Gamma}, \gamma=\overline{\gamma}T,$$

$$\psi=\frac{\overline{\psi}}{u_\Sigma}, \varphi=\frac{\overline{\varphi}}{a_\Sigma}, \mu(t)=\frac{\overline{\mu}(tT)}{u_\Sigma}, k(a)=\overline{k}(a_\Sigma a).$$

Тогда уравнения (1)-(5) преобразуем к виду

$$\varepsilon u_t+\nu u_x+a_t=0,\ 0<x\le 1,\ 0<t\le 1, \tag{6}$$

$$a_t=\beta(u-\psi)=\gamma(\varphi-a),\ 0\le x\le 1,\ 0<t\le 1, \tag{7}$$

$$\varphi=\frac{\psi k(a)}{1+(k(a)-1)\psi} \tag{8}$$

$$u(0,t)=\mu(t),\ 0<t\le 1, \tag{9}$$

$$u(x,0)=0,\ a(x,0)=0,\ 0\le x\le 1. \tag{10}$$

Из уравнений (7), (8) следует, что

$$\beta(u-\psi)=\gamma(\frac{\psi k(a)}{1+(k(a)-1)\psi}-a).$$

Введя обозначения

$$c=\beta u+\gamma a, m=\frac{\beta+\gamma k(a)}{k(a)-1}, n=\frac{1}{k(a)-1}, \tag{11}$$

получим уравнение $\beta\psi^2+\psi(m-c)-nc=0$.

Тогда

$$\psi=\frac{c-m+\sqrt{(c-m)^2+4\beta nc}}{2\beta},\ \text{т.е.}\ \psi=\psi(u,a,k).$$

Вместо задачи (6)-(10) будем рассматривать следующую задачу

$$\varepsilon u_t+\nu u_x+a_t=0,\ 0<x\le 1,\ 0<t\le 1, \tag{12}$$

$$a_t=\beta(u-\psi(u,a,k)),\ 0\le x\le 1,\ 0<t\le 1, \tag{13}$$

$$\psi = \frac{c - m + \sqrt{(c-m)^2 + 4\beta nc}}{2\beta}, \tag{14}$$

$$u(0,t) = \mu(t),\ 0 < t \le 1, \tag{15}$$

$$u(x,0) = 0,\ a(x,0) = 0,\ 0 \le x \le 1. \tag{16}$$

Сформулируем теперь обратную задачу. Пусть известны функция $\mu(t)$, коэффициенты $\beta, \gamma, \varepsilon, \nu$ и задана функция

$$f(t) = u\ (1,t),\ t \in [0,1]. \tag{17}$$

Требуется определить коэффициент равновесия $k(a)$ и функции $\{u(x,t), a(x,t)\} \in C^1[D\ ]\}$, удовлетворяющие (11)–(17), где $D\ = \{(x,t),\ 0 \le x \le 1,\ 0 \le t \le 1\}$.

Будем предполагать, что функция $k(\xi)$ допускает параметризацию $k(\xi,d)$, где $d \in Q^N \in R^N$, Q^N – компакт в R^N, и соответствие между $k(\xi,d)$ и d взаимно однозначно. Это могут быть либо многочлены равномерного приближения, либо сплайны.

Предположим также, что функции $\mu(t)$, $k(a)$ удовлетворяют следующим условиям

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

$$k(\xi,d) \in C^2(-\infty,\infty) \times Q^N,\ k(0,d) = k_0,\ |k(\xi,d)| < k_1\ \ 0 < k'(\xi,d) \le k_2, \xi \in (-\infty,\infty),$$

где $k_i, i = 0,1,2$ – положительные постоянные.

Рассмотрим численный метод решения обратной задачи, основанный на дескриптивной регуляризации с градиентным методом. При известных функциях $k(\xi,d), \mu(t)$ задача (11)–(16) определяет непрерывный оператор $A\,k(\xi,d) = u(1,t,d) = f\ (t),\ 0 < t \le 1$. Так как обычно дополнительная информация $f\ (t)$ известна из эксперимента с погрешностью δ, т.е. известна функции $f_\delta(t)$ такая, что $\|f_\delta(t) - f\ (t)\|_{L_2[0,T]} \le \delta$, то обратную задачу (11)-(17) естественно рассматривать как задачу решения операторного уравнения $A\,k(\xi,d) = f_\delta(t), 0 < t \le 1$ с приближенно заданной правой частью. В качестве приближенного решения будем рассматривать функцию $k(\xi,d_\delta)\ (d_\delta \in Q^N)$, удовлетворяющие неравенству $S(d) = \|A\,k(\xi,d) - f_\delta(t)\|_{L_2[0,1]} \le \delta$. Для этого будем минимизировать невязку

$$S(d) = \int_0^1 (u\ (1,t,d) - f_\delta(t))^2\,dt \tag{19}$$

методом условного градиента с критерием $S(d) \le \delta^2$ для окончания процесса минимизации.

Получим формулу градиента для функционала невязки. Обозначим через $u(x,t,d), a(x,t,d)$ решение задачи (11)-(16), соответствующие $k(\xi,d)$, а через $u(x,t,d+\Delta d), a(x,t,d+\Delta d)$ решение, соответствующие функции $k(\xi,d+\Delta d)$. Тогда функции

$$\Delta u(x,t,d) = u(x,t,d+\Delta d) - u(x,t,d), \Delta a(x,t,d) = a(x,t,d+\Delta d) - a(x,t,d)$$

являются решением задачи

$$\varepsilon \Delta u_t + \nu \Delta u_x + \Delta a_t = 0,\ 0 < x \le 1,\ 0 < t \le 1, \tag{20}$$

$$\Delta a_t = \beta(\Delta u(1-\psi_u) - \Delta a(\psi_a + \psi_k k_a) - \psi_k k_d \Delta d - R),\ 0 \le x \le 1,\ 0 < t \le 1, \tag{21}$$

$$\Delta u(0,t) = 0,\ 0 < t \le 1, \tag{22}$$

$$\Delta u(x,0) = 0,\ \Delta a(x,0) = 0,\ 0 \le x \le 1. \tag{23}$$

Так как

$$\psi(u(x,t,d+\Delta d), a(x,t,d+\Delta d), k(a(x,t,d+\Delta d))) -$$

$$- \psi(u(x,t,d), a(x,t,d), k(a(x,t,d))) =$$

$$= \Delta u \psi_u + \Delta a(\psi_a + \psi_k k_a) + \psi_k k_d \Delta d + R, \quad \text{где} \quad R = o(d).$$

Рассмотрим задачу, называемую сопряженной задаче (20)-(23)

$$\varepsilon \alpha_t + \nu\ \alpha_x - \beta(1-\psi_u)(\alpha - \eta) = 0,\ 0 \le x < 1,\ 0 \le t < T, \tag{24}$$

$$\eta_t + \beta(\psi_a + \psi_k k)(\alpha - \eta) = 0,\ 0 \le x \le 1,\ 0 \le t < T, \tag{25}$$

$$\alpha(1,t) = 2(u(1,t,d) - f_\delta(t)),\ 0 \le t < T, \tag{26}$$

$$\alpha(x,1) = 0,\ \eta(x,1) = 0,\ 0 \le x \le 1 \tag{27}$$

Преобразуем выражение

$$I = \iint_D \alpha(\varepsilon \Delta u_t + \nu \Delta u_x + \beta \Delta u(1-\psi_u) - \beta \Delta a(\psi_a + \psi_k k_a) +$$

$$+ \eta(\Delta a_t - \beta(\Delta u(1-\psi_u) - \Delta a(\psi_a + \psi_k k_a)) +$$

$$+ \Delta u(\varepsilon \alpha_t + \nu\ \alpha_x - \beta(1-\psi_u)(\alpha - \eta) +$$

$$+ \Delta a(\eta_t + \beta(\psi_a + \psi_k k)(\alpha - \eta))dxdt =$$

$$\int_0^1 (\varepsilon \alpha \Delta u + \eta \Delta a)\Big|_{t=0}^{t=1} dx + \int_0^1 \nu \Delta u \alpha \Big|_{x=0}^{x=1} dt.$$

Учитывая начальные и граничные условия (22)-(23), (26)-(27), получим

$$I = 2\int_0^1 \Delta u(1,t)(u(1,t,d) - f_\delta(t))dt$$

С другой стороны из (20),(21) следует, что

$$I = \iint_D (\alpha - \eta)(\psi_k k_d \Delta d + R)dxdt$$

Учитывая, что приращение функционала невязки имеет вид

$$\Delta S = S(d + \Delta d) - S(d) = 2\int_0^1 \Delta u(1,t)(u(1,t,d) - f_\delta(t))dt + \int_0^1 (\Delta u(1,t))^2 dt$$

и пренебрегая величинами второго порядка малости, получим, что градиент невязки имеет вид

$$S_{d_i} = \int_0^1\int_0^1 \psi_k k_d(a,d)(\alpha(x,t) - \eta(x,t))dxdt, \quad i = 1,\dots,N.$$

Функции $k(\xi,d)$ будем искать в виде

$$k(\xi,d) = (d_0 + \sum_{k=1}^{N} d_k C_N^k \xi^k (1-\xi)^{N-k})e^{\frac{-E_K}{RT}},\ d_0 = k_0, d_{k+1} \le d_k, d_N > 0,$$

E_k, R, T – известные константы. Нетрудно проверить, что соответствие между d и $k(\xi,d)$ взаимно однозначно. Очевидно, множество Q_N представляют собой выпуклый многогранник в R^N.

Для минимизации $S(d)$ на множестве Q_N можно использовать также метод случайного поиска.

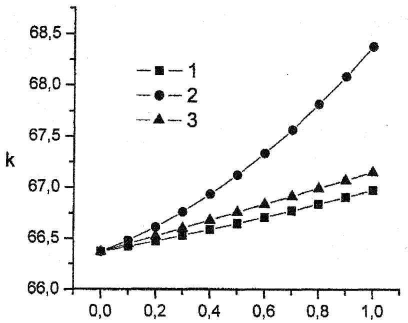

Рис. 1

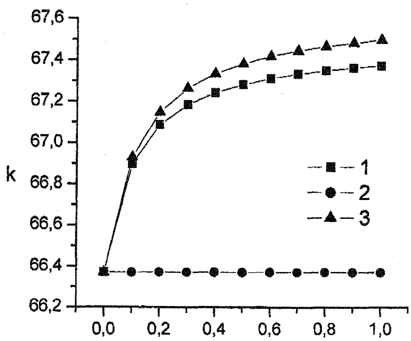

Рис. 2

Был проведен вычислительный эксперимент. Для известных функций $\mu(t), k(\xi)$ решались задача (1)–(5) и определялись $f(t)=u(1,t)$. Затем функция возмущалась $f_\delta(t)=f(t)+\varepsilon\, s(t)$, где $s(t)$ случайная величина, равномерно распределенная на $[-1,1]$, $\varepsilon=0.02$ – погрешность эксперимента. Функция $f_\delta(t)$ использовались как исходная информация для решения обратных задач (11)–(17) предложенным методом. Были взяты функция $\overline{\mu}(t)=0{,}000236$ и параметры были равны:

$l=26.3, \nu=0.219, k_0=66.4, c_\Sigma=1{,}000236, a_\Sigma=1.4, \beta=0.6e^{-3.28}, \gamma=0.07e^{-6.52}$.

На рис.1 приведены результаты восстановления функции $k(\xi)=(k_0+0.5\xi+0.1\xi^2)e^{-4.38}$ для задачи (11)–(17). Погрешность равна $S=0.0027$. На рис.2 приведены результаты восстановления функции. Погрешность равна $S=0.0032$. Кривые 1 соответствует точным данным, 2 – начальному приближению, 3 – восстановленным предложенным методом. Приведенные результаты показывают эффективность предложенного алгоритма решения этой обратной задачи.

Автор благодарит Н.А. Тихонова и Р.Х. Хамизова за постановку математической модели.

Литература

1. Денисов А.М., Лукшин А.В. Математические модели однокомпонентной динамики сорбции. М.:1989.
2. Денисов А.М. Единственность определения нелинейного коэффициента системы уравнений в частных производных в малом и в целом // Докл. РАН. 1994. Т. 338(4). с.444-447
3. 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.
4. Денисов А.М., Туйкина С.Р. О некоторых обратных задачах неравновесной динамики сорбции //ДАН СССР.1984. 276, №1. с.100–102.
5. Denisov A.M., Lamos H. An inverse problem for a nonlinear mathematical model of sorption dynamics with mixed-diffusional kinetics// J. Inverse and Ill-Posed Probl. 4 (1996), N 3, pp. 191-202.
6. Туйкина С.Р., Соловьева С. И. Обратные задачи для одной математической модели ионообмена в случае сжимаемости ионита // Прикладная математика и информатика.2003. 14. 55-66.
7. Венецианов Е.В., Рубинштейн Р.Н. Динамика сорбции из жидких сред. М.: Наука, 1983.