С.Р. Туйкина, С.И. Соловьева

О ЧИСЛЕННОМ ОПРЕДЕЛЕНИИ ДВУХ ХАРАКТЕРИСТИК ИОНИТА В СЛУЧАЕ ЕГО СЖИМАЕМОСТИ *

При анализе ионообменных процессов возникает необходимость определения одной или нескольких характеристик процесса (изотерма ионообмена, пористость, кинетический коэффициент, коэффициент диффузии) по экспериментальной информации. Эти коэффициенты определяются из решения обратных задач для математических моделей ионообмена по экспериментальным выходным концентрационным кривым. В данной работе рассматриваются две математические модели ионообмена, учитывающие внешнедиффузионную кинетику и сжимаемость ионита в процессе ионообмена [1– 3].

Для математической модели, не учитывающей продольную диффузию, исследуются обратные задачи, состоящие в одновременном определении двух характеристик, зависящих от концентрации поглощенных ионов (функции, обратной к изотерме ионообмена, и либо длины ионита, либо пористости). В работе [4] для данной модели рассмотрены обратные задачи, заключающиеся в определении одной из этих характеристик. Обратные задачи одновременного определения изотермы и кинетического коэффициента и методы их решения изучены в работах [5], [6]. Для математической модели, учитывающей продольную диффузию, рассмотрены обратные задачи, состоящие в определении либо функции, обратной к изотерме, либо пористости по выходной динамической кривой. Для этих обратных задач исследуется единственность решения, предлагаются численные методы их решения.

1. Математическая модель ионообмена без учета продольной диффузии.

Рассмотрим математическую модель ионообмена в случае внешнедиффузионной кинетики, учитывающую сжимаемость ионита и зависимость пористости от концентрации поглощенных ионов

$$u_y + \delta(a)a_t = 0,\ 0 \le y \le d(t),\ 0 < t \le T, \qquad (1)$$

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

$$u(0,t) = \mu(t),\ 0 < t \le T, \qquad (3)$$

---

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

$$a(y,0)=0,\ 0\le y\le d(0). \qquad (4)$$

Здесь $u(y,t), a(y,t)$ – концентрации ионов в растворе и ионите, $\psi(\xi)$ – функция обратная изотерме ионообмена, $\delta(a)=(1-\varepsilon(a))/\varepsilon(a)$, где $\varepsilon(a)$ – пористость ионита (отношение свободного пространства к объему колонки), $\mu(t)$ – входная концентрация, $d(t)$ –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

$$u_x+p(a)(u-\psi(a))=0,\ (x,t)\in Q_T, \qquad (5)$$

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

$$u(0,t)=\mu(t),\ 0<t\le T, \qquad (7)$$

$$a(x,0)=0,\ 0\le x\le 1, \qquad (8)$$

где $p(a)=l(a)\delta(a),\ d(t)=l(a(1,t))$, $l(0)=d(0)$,
$Q_T=\{(x,t),\ 0\le x\le 1,\ 0\le t\le T\}$.

Пусть функции $\mu(t),\ \psi(\xi), p(\xi)$ удовлетворяют следующим условиям

$$\mu(t)\in C^1[0,T],\ \mu(0)=0,\ \mu'(t)>0, t\in[0,T], \qquad (9)$$

$$\psi(\xi)\in C^2(-\infty,\infty), \psi(0)=0, \psi(\infty)>\mu(T), 0<\psi'(\xi)\le C_1, \xi\in(-\infty,\infty) \qquad (10)$$

$$p(\xi)\in C^2(-\infty,\infty),\ 0<p(\xi)<l(0)\delta(0),\ C_2<p'(\xi)\le 0, \xi\in(-\infty,\infty) \qquad (11)$$

где C_1, C_2 – положительные постоянные.

При выполнении этих условий аналогично работам [7, 8] доказывается, что существует единственное решение задачи (5)–(8) $\{u(x,t), a(x,t)\}\in C^1[Q_T]\}$ такое, что

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

$$u_t(x,t)>0,\ a_t(x,t)>0,\ a_x(x,t)<0,\ 0\le x\le 1, 0<t\le T.$$

Будем рассматривать следующие обратные задачи.

Задача 1. Известны функции $\mu_i(t), \delta(\xi)$ и функции

$$f_i(t) = u_i(1,t),\ t \in [0, T_i],\ i = 1,2, \qquad (12)$$

определить $\psi(\xi), l(\xi), u_1(x,t), a_1(x,t), u_2(x,t), a_2(x,t)$, удовлетворяющие (5)–(8), (12).

Решением обратной задачи (5)–(8), (12) назовем функции $\psi(\xi), l(\xi),\ u_1(x,t), a_1(x,t), u_2(x,t), a_2(x,t)$, удовлетворяющие (5)–(8), (12) такие, что $p(\xi) = l(\xi)\delta(\xi)$ удовлетворяет (11) и $u, a \in C^1[Q_T]$.

Задача 2. Известны функции $\mu_i(t), d_i(t)$ и функции $f_i(t), i = 1,2$, определить $\psi(\xi), \delta(\xi),\ u_1(x,t), a_1(x,t), u_2(x,t), a_2(x,t)$ удовлетворяющие (5)–(8), (12).

Решением обратной задачи (5)–(8), (12) назовем функции $\psi(\xi), \delta(\xi), u_1(x,t), a_1(x,t), u_2(x,t), a_2(x,t)$, удовлетворяющие (5)–(8), (12) такие, что $p(\xi) = l(\xi)\delta(\xi)$ удовлетворяет (11) и $u, a \in C^1[Q_T]$.

Заметим, что в задачах 1,2 из условий (5)–(8), (12) мы вначале определяем $\psi(\xi), p(\xi)$, а затем в задаче 1 однозначно находим $l(\xi) = p(\xi)/\delta(\xi)$, тем самым определяем, как движется граница ионита $d(t) = l(a(1,t))$, а в задаче 2 определив $l(\xi)$ из уравнения $l(f_1(t)) = d_1(t)$, затем находим $\delta(\xi) = p(\xi)/l(\xi)$ и пористость $\varepsilon(\xi)$.

Сформулируем поэтому следующую вспомогательную задачу.

Известны функции $\mu_i(t)$ и функции $f_i(t), i = 1,2$, определить $\psi(\xi), p(\xi),\ u_1(x,t), a_1(x,t), u_2(x,t), a_2(x,t)$ удовлетворяющие (5)–(8), (12).

Единственность решения этой обратной задачи имеет большое значение для построения устойчивых методов численного решения задач 1, 2.

Для обратной задачи (5)–(8), (12) методом, предложенным в работе [5], докажем теорему единственности.

Теорема 1. Если $\psi_j(\xi), p_j(\xi),\ u_{1j}(x,t), a_{1j}(x,t), u_{2j}(x,t), a_{2j}(x,t)$, $j = 1, 2$ решения обратной задачи (5)–(8), (12), $\mu_i(t), \psi(\xi)$ удовлетворяют (9), (10), $(\mu_1^{-1}(\xi))' < (\mu_2^{-1}(\xi))'$ для $\xi \in [0,\theta], \mu_1(T_1) = \mu_2(T_2) = \theta$ и существует $\xi_0 > 0$, такое что $\psi_1(\xi) = \psi_2(\xi), p_1(\xi) = p_2(\xi)$ для $\xi \in [0, \xi_0]$, то $\psi_1(\xi) = \psi_2(\xi), p_1(\xi) = p_2(\xi)$ для $\xi \in [0, \alpha]$, $u_{11}(x,t) = u_{21}(x,t)$, $a_{11}(x,t) = a_{21}(x,t)$ в $Q_{\tilde{T}_1}$, $u_{12}(x,t) = u_{22}(x,t)$, $a_{12}(x,t) = a_{22}(x,t)$ в $Q_{\tilde{T}_2}$, где $\alpha = \min\limits_{i=1,2} a_i(0, T_i)$, $\tilde{T}_i = a_i^{-1}(0, \alpha), i = 1,2$

Доказательство. Функции $v_i(x,t) = u_{i1}(x,t) - u_{i2}(x,t)$, $w_i(x,t) = a_{i1}(x,t) - a_{i2}(x,t)$ являются решением задачи

$$v_{ix} + p_1(a_{i1})v_i + a_{i2t}b(a_{i1}) - H_i w_i = 0, \ (x,t) \in Q_{T_i}, \tag{14}$$

$$w_{it} = v_i - z(a_{i1}) - qw_i, \ (x,t) \in Q_{T_i}, \tag{15}$$

$$v_i(0,t) = 0, \ 0 \le t \le T_i, \tag{16}$$

$$w_i(x,0) = 0, \ 0 \le x \le 1, i = 1,2 \tag{17}$$

где

$$b(\xi) = p_1(\xi) - p_2(\xi), \ g_i(x,t) = \int_0^1 p_2'(a_{i2}(x,t) + \theta(a_{i1}(x,t) - a_{i2}(x,t)))d\theta,$$

$$z(\xi) = \psi_1(\xi) - \psi_2(\xi), \ q_i(x,t) = \int_0^1 \psi_2'(a_{i2}(x,t) + \theta(a_{i1}(x,t) - a_{i2}(x,t)))d\theta$$

$$H_i(x,t) = -a_{i2t}(x,t)g_i(x,t) + p_1(a_{i1}(x,t))q_i(x,t).$$

Из (14) – (17) получим интегральные уравнения

$$v_i(x,t) = f_i(x,t) + \int_0^x\int_0^t K_i(x,\xi,t,\tau)v_i(\xi,\tau)d\tau d\xi, \tag{18}$$

где

$$f_i(x,t) = \int_0^x \exp(-\int_\xi^x p_1(a_{i1}(\eta,t))d\eta)[p_1(a_{i1}(\xi,t))\, z(a_{i1}(\xi,t)) -$$

$$- a_{i2t}(\xi,t)b(a_{i1}(\xi,t))H_i(\xi,t)\int_0^t \exp(-\int_\tau^t q(x,\theta)d\theta)\, z(a_{i1}(\xi,\tau))d\tau]d\xi,$$

$$K_i(x,\xi,t,\tau) = \exp(-\int_\xi^x p_1(a_{i1}(\eta,t))d\eta - \int_\tau^t q(\xi,\theta)d\theta)H_i(\xi,t).$$

Разрешив уравнения (18), получим

$$v_i(x,t) = f_i(x,t) + \int_0^x\int_0^t R_i(x,\xi,t,\tau)f_i(\xi,\tau)d\tau d\xi,$$

где резольвенты $R_i(x,\xi,t,\tau)$ неотрицательны, непрерывны и имеют непрерывные первые частные производные при $0 \le \xi \le x \le 1, 0 \le \tau \le t \le T$.

Поменяем порядок интегрирования и введем обозначения

$$B_i(x,\xi,t,\tau) = -\exp(-\int_\xi^x p_1(a_{i1}(\eta,t))d\eta - \int_\tau^t q(x,\theta)d\theta)H_i(\xi,t) -$$

$$-\int_\xi^x\int_\tau^t R_i(x,s,t,p)\exp(-\int_\xi^s p_1(a_{i1}(\eta,p))d\eta - \int_\tau^t q(s,\theta)d\theta)H_i(\xi,p)dpds +$$

$$+\int_\xi^x R_i(x,s,t,\tau)\exp(-\int_\xi^s p_1(a_{i1}(\eta,\tau))d\eta)p_1(a_{i1}(\xi,\tau))ds$$

$$G_i(x,\xi,t,\tau) = \int_\xi^x R_i(x,s,t,\tau)\exp(-\int_\xi^s p_1(a_{i1}(\eta,\tau))d\eta)a_{i2t}(\xi,\tau)ds$$

$$h_i(x,\xi,t) = \exp(-\int_\xi^x p_1(a_{i1}(\eta,t))d\eta),$$

$$L_i(\xi,t) = p_1(a_{i1}(\xi,t)),$$

$$S_i(\xi,t) = a_{i2t}(\xi,t).$$

Тогда получим

$$v_i(x,t) = \int_0^x\int_0^t B_i(x,\xi,t,\tau)z(a_{i1}(\xi,\tau)) - G_i(x,\xi,t,\tau)b(a_{i1}(\xi,\tau))d\tau d\xi +$$

$$+\int_0^x h_i(x,\xi,t)(L_i(\xi,t)z(a_{i1}(\xi,\tau)) - S(\xi,t)b(a_{i1}(\xi,\tau))d\xi, i=1,2$$

Пусть T_0^i – корень уравнения $a_i(0,t) = \xi_0$ при $\xi_0 < \alpha$ или $T_0^i = T_i$ при $\xi_0 \ge \alpha_0$. Так как $z(\xi) = 0, b(\xi) = 0$ при $\xi \in [0,\xi_0]$, то $z(a_{i1}(x,t)) = 0$, $b(a_{i1}(x,t)) = 0$ в $Q_{T_{i0}}$.

Учитывая (12), получим

$$\int_{T_{i0}}^t\int_0^1 (P_i^1(\xi,t,\tau)z(a_{i1}(\xi,\tau)) + P_i^2(\xi,t,\tau)b(a_{i1}(\xi,\tau))d\tau d\xi -$$

$$-\int_0^1 (P_i^3(\xi,t)z(a_{i1}(\xi,\tau)) + P_i^4(\xi,t)b(a_{i1}(\xi,\tau))d\xi = 0, i=1,2,$$

где $P_i^1(\xi,t,\tau)=B_i(1,\xi,t,\tau), P_i^2(\xi,t,\tau)=-G_i(1,\xi,t,\tau),$

$$P_i^3(\xi,t)=-h_i(1,\xi,t)L_i(\xi,t), P_i^4(\xi,t)=h_i(1,\xi,t)S_i(\xi,t)$$

Обозначим через $y_i(r,t)$ функцию обратную $a_{i1}(\xi,t)$, где $r=a_1(\xi,t)$. Пусть T_{i1} корень уравнения $a_{i1}(1,t)=\xi_0$ при $a_{i1}(1,T_i)>\xi_0$ или $T_{i1}=T_i$ при $a_{i1}(1,T)\le\xi_0$, тогда при $t\in[T_{i0},T_{i1}]$, поменяв порядок интегрирования, получим уравнение

$$\int_{\xi_0}^{\omega_i(t)}\left(\int_{\omega_i^{-1}(r)}^{t}\left(\tilde{P}_i^1(r,t,\tau)z(r)+\tilde{P}_i^2(r,t,\tau)b(r)\right)d\tau-\left(\tilde{P}_i^3(r,t)z(r)+\tilde{P}_i^4(r,t)b(r)\right)\right)dr=0,$$
$i=1,2$

где $\omega_i(t)=a_{i1}(1,t), \tilde{P}_i^j(r,t,\tau)=\dfrac{P_i^j(y_i(r,\tau),t,\tau)}{a_{i1x}(y_i(r,\tau),\tau)}, \tilde{P}_i^j(r,t)=\dfrac{P_i^j(y_i(v,t),t)}{a_{i1x}(y_i(v,t),t)}$.

Введя новую переменную $\xi=\omega_i(t)$, тогда $t=\omega_i^{-1}(\xi)$, и обозначив

$$R_{i1}(r,\theta)=\int_{\omega_i^{-1}(r)}^{\omega_i^{-1}(\theta)}\tilde{P}_i^1(r,\omega_i^{-1}(\theta),\tau)d\tau-\tilde{P}_i^3(r,\omega_i^{-1}(\theta)),$$

$$R_{i2}(r,\theta)=\int_{\omega_i^{-1}(r)}^{\omega_i^{-1}(\theta)}\tilde{P}_i^2(r,\omega_i^{-1}(\theta),\tau)d\tau-\tilde{P}_i^4(r,\omega_i^{-1}(\theta)),$$

получим

$$\int_{\xi_0}^{\theta}(R_{i1}(r,\theta)z(r)+R_{i2}(r,\theta)b(r))dr=0,\ r\in[\xi_0,\xi_1],\ \xi_1=\min_{i=1,2}\omega_i(T_{i1}), i=1,2.$$

Продифференцировав по θ, получим систему интегральных уравнений

$$R_{i1}(\theta,\theta)z(\theta)+R_{i2}(\theta,\theta)b(\theta)+\int_{\xi_0}^{\theta}(R_{i1\theta}(r,\theta)z(r)+R_{i2\theta}(r,\theta)b(r))dr=0,\ i=1,2.$$

Учитывая, что $\Delta(\theta)=R_{11}(\theta,\theta)R_{22}(\theta,\theta)-R_{12}(\theta,\theta)R_{21}(\theta,\theta)>0$ при $\theta\in[\xi_0,\xi_1]$, разрешим последнюю систему

$$z(\theta) = \int_{\xi_0}^{\theta} (\widetilde{R}_{11}(r,\theta)z(r) + \widetilde{R}_{12}(r,\theta)b(r))dr,$$

$$b(\theta) = \int_{\xi_0}^{\theta} (\widetilde{R}_{21}(r,\theta)z(r) + \widetilde{R}_{22}(r,\theta)b(r))dr,$$

где $\widetilde{R}_{1j}(r,\theta) = (R_{12}(\theta,\theta)R_{2j\theta}(r,\theta) - R_{22}(\theta,\theta)R_{1j\theta}(r,\theta)) / \Delta(\theta)$

$$\widetilde{R}_{2j}(r,\theta) = (R_{21}(\theta,\theta)R_{1j\theta}(r,\theta) - R_{11}(\theta,\theta)R_{2j\theta}(r,\theta)) / \Delta(\theta), j = 1{,}2.$$

Следовательно, $z(\xi) = b(\xi) = 0$ для $\xi \in [\xi_0, \xi_1]$. Повторяя этот процесс конечное число раз, получим $z(\xi) = b(\xi) = 0$ для $\xi \in [0, \min\limits_{i=1,2} a_i(0, T_i)]$.

Тогда $u_{11}(x,t) = u_{21}(x,t), a_{11}(x,t) = a_{21}(x,t)$ в $Q_{\widetilde{T}\,1}$,

$u_{12}(x,t) = u_{22}(x,t), a_{12}(x,t) = a_{22}(x,t)$ в $Q_{\widetilde{T}\,2}$, $\widetilde{T}_i = a_i^{-1}(0,\alpha), i = 1{,}2$.

Теорема доказана.

Рассмотрим численный метод решения вспомогательной обратной задачи, основанный на дескриптивной регуляризации с градиентным методом. Будем дополнительно предполагать, что $\psi(\xi,\lambda) \in C^{1,1}[M]$, $M = (-\infty,\infty) \times \Lambda_N$, $p(\xi,d) \in C^{1,1}[D]$,

$D = (-\infty,\infty) \times Q_N$, Λ_N, Q_N – компакты в R^N. Множество таких функций, удовлетворяющих по ξ условиям теоремы единственности обозначим через Φ. Тогда при известных функциях $\psi(\xi,\lambda), p(\xi,d), \mu_i(t), i = 1{,}2$ задача (5)–(8) определяет оператор $A\{\lambda, d\} = \{f_1(t), f_2(t)\}$ непрерывный и взаимно однозначный в классе функций Φ. Пусть дополнительная информация $\{f_1(t), f_2(t)\}$ задана с погрешностью δ, т.е. известны функции $f_{i\delta}(t)$ такие, что $\|f_{i\delta}(t) - f_i(t)\|_{L_2[0,T]} \le \delta, i = 1{,}2$.

Будем минимизировать невязку

$$S(\lambda,d) = \sum_{i=1,2} \int_0^T (u_i(1,t,\lambda,d) - f_{i\delta}(t))^2 dt$$

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

$$S_\lambda = \sum_{i=1}^{2} \int_0^T \int_0^1 (p(a(x,t))\alpha(x,t) - \eta(x,t))\psi_\lambda(a(x,t))dxdt$$

$$S_d = \sum_{i=1}^{2} \int_0^T \int_0^1 p_d(a(x,t))(\psi(a(x,t)) - u(x,t))\alpha(x,t)dxdt,$$

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

$$\alpha_x - l(a)\alpha + \eta = 0, 0 \le x < 1, 0 \le t < T,$$

$$\eta_t + \psi_a(l\alpha - \eta) - l_a(u - \psi)\alpha = 0, 0 \le x \le 1, 0 \le t < T,$$

$$\alpha(1,t) = 2(u(1,t,\lambda) - f_\delta(t)), 0 \le t < T,$$

$$\eta(x,T) = 0, 0 \le x \le 1.$$

Функции будем искать в виде многочленов Бернштейна

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

$$p(\xi,d) = \sum_{k=0}^{N} d_k C_N^k \xi^k (1-\xi)^{N-k}, d_0 = p(0), d_{k+1} \le d_k, d_N > 0.$$

Нетрудно проверить, что соответствие между λ и $\psi(\xi,\lambda)$, d и $p(\xi,d)$ взаимно однозначно. Очевидно, что $\psi(\xi,\lambda), p(\xi,d)$ принадлежат множеству функций Φ, а множества Λ_N, Q_N представляют собой выпуклые многогранники в R^N.

Для минимизации $S(\lambda,d)$ на множествах Λ_N, Q_N можно использовать также метод случайного поиска.

2. Математическая модель ионообмена с учетом продольной диффузии.

Рассмотрим математическую модель ионообмена, учитывающую внешнедиффузионную кинетику, продольную диффузию и сжимаемость ионита

$$u_t + vu_x + \delta(a)a_t = Du_{xx}, 0 \le x \le d(t), 0 < t \le T, \tag{19}$$

$$a_t = u - \psi(a), 0 \le x \le d(t), 0 < t \le T, \tag{20}$$

$$u(0,t) = \mu(t), u(d(t),t) + \lambda u_x(d(t),t) = 0, 0 < t \le T, \tag{21}$$

$$u(x,0) = 0, a(x,0) = 0, 0 \le x \le d(0) \tag{22}$$

Здесь $u(y,t), a(y,t)$ – концентрации ионов в растворе и ионите, $\psi(\xi)$ – функция обратная изотерме ионообмена, $\delta(a) = (1 - \varepsilon(a)) / \varepsilon(a)$, где $\varepsilon(a)$ – пористость ионита, $\mu(t)$ – входная концентрация, $d(t)$ – длина ионита, v – скорость потока, D – коэффициент продольной диффузии. Пусть функции $\mu(t)$, $\psi(\xi), \delta(\xi)$ удовлетворяют следующим условиям

$$\mu(t) \in C^2[0,T],\ \mu(0) = \mu'(0) = 0,\ \mu'(t) > 0, t \in [0,T], \tag{23}$$

$$\psi(\xi) \in C^2(-\infty,\infty), \psi(0) = 0,\ 0 < \psi'(\xi) \le C_1, \psi''(\xi) \ge 0, \xi \in (-\infty,\infty) \tag{24}$$

$$\delta(\xi) \in C^2(-\infty,\infty),\ C_2 \le \delta(\xi) \le C_3, \delta'(\xi) \le 0, \xi \in (-\infty,\infty) \tag{25}$$

$$d(t) \in C^2(0,T),\ C_4 \le d(t) \le d(0), d'(t) \le 0, t \in (0,T) \tag{26}$$

где $C_i, i = 1,4$ – положительные постоянные.

При выполнении этих условий аналогично работе [9] доказывается, что единственное решение задачи (19)–(22) $\{u(x,t), a(x,t)\} \in C^2[Q_T]\}$ удовлетворяет условиям

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

$$u_t(x,t) > 0,\ a_t(x,t) > 0,\ a_x(x,t) < 0,\ 0 \le x \le 1, 0 < t \le T.$$

Будем рассматривать две обратные задачи.

Задача 3. Известны функции $\mu(t), \delta(\xi), d(t)$ и функция

$$f(t) = u(d(t),t), t \in [0,T], \tag{27}$$

определить $\psi(\xi), u(x,t), a(x,t)$, удовлетворяющие (23)–(26), (27).

Задача 4. Известны функции $\mu(t), \psi(\xi), d(t)$ и функция $f(t)$, определить $\delta(\xi)$, $u(x,t), a(x,t)$, удовлетворяющие (23)–(26), (27).

Для обратных задач 3, 4 методом, предложенным в работе [9], доказываются теоремы единственности.

Теорема 2. Если $\psi_j(\xi)$, $u_j(x,t), a_j(x,t), j = 1,2$ решения обратной задачи 3, $\mu(t), \psi(\xi), \delta(\xi), d(t)$ удовлетворяют (23)–(26) и $\psi(\xi)$ аналитична на интервале, содержащем отрезок $[0, \mu(T)]$, то $\psi_1(\xi) = \psi_2(\xi)$ для $\xi \in [0, \mu(T)], u_1(x,t) = u_2(x,t),\ a_1(x,t) = a_2(x,t)$ при $0 \le x \le d(t),\ 0 \le t \le T$.

Теорема 3. Если $\delta_j(\xi)$, $u_j(x,t), a_j(x,t), j = 1,2$ решения обратной задачи 4, $\mu(t), \psi(\xi), \delta(\xi), d(t)$ удовлетворяют (23)–(26) и $\delta(\xi)$ аналитична на интервале, содержащем отрезок $[0, \mu(T)]$, то $\delta_1(\xi) = \delta_2(\xi)$ для $\xi \in [0, \mu(T)]$, $u_1(x,t) = u_2(x,t),\ a_1(x,t) = a_2(x,t)$ при $0 \le x \le d(t)$,

$0 \le t \le T$.

Для решения задач 3, 4 также применим численный метод решения, основанный на дескриптивной регуляризации с градиентным методом. Будем также предполагать, что $\psi(\xi,\lambda) \in C^{1,1}[M]$, $M = (-\infty,\infty) \times \Lambda_N$, $\delta(\xi,\vartheta) \in C^{1,1}[D]$, $D = (-\infty,\infty) \times Q_N$, Λ_N, Q_N –компакты в R^N. Пусть дополнительная информация задана с погрешностью δ, т.е. известна функция $f_\delta(t)$ такие, что $\|f_\delta(t) - f(t)\|_{L_2[0,T]} \le \delta$,.

Для задачи 3 будем минимизировать невязку

$$S(\lambda) = \int_0^T (u\ \ (d(t),t,\lambda) - f_\delta(t))^2\,dt$$

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

$$S_\lambda = \int_0^T \int_0^1 (\delta(a(x,t))\alpha(x,t) - \eta(x,t))\psi_\lambda(a(x,t))dxdt$$

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

$$\alpha_x + D\alpha_{xx} + v\alpha_x - \delta(a)\alpha + \eta = 0, 0 \le x < d(t), 0 \le t < T,$$

$$\eta_t + \psi_a(\delta\alpha - \eta) - \delta_a(u - \psi)\alpha = 0, 0 \le x \le d(t), 0 \le t < T,$$

$$\alpha(0,t) = 0, D\alpha_x + (v + D/\lambda)\alpha = 2(u(d(t),t,\lambda) - f_\delta(t)), 0 \le t < T,$$

$$\alpha(x,T) = 0, \eta(x,T) = 0, 0 \le x \le d(t).$$

Для задачи 4 градиент невязки $S(\vartheta) = \int_0^T (u\ \ (d(t),t,\vartheta) - f_\delta(t))^2\,dt$ имеет вид

$$S_\vartheta = \int_0^T \int_0^1 \delta_\vartheta(a(x,t))(\psi(a(x,t)) - u(x,t))\alpha(x,t)dxdt,$$

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

Функции $\psi(\xi,\lambda)$, $\delta(\xi,\vartheta)$ будем также искать в виде многочленов Бернштейна.

3. Численный эксперимент.

Схема вычислительного эксперимента состояла в следующем. Для известных функций $\mu_i(t), \psi(\xi), \delta(\xi), d(t)$ решались задача (1)–(4) и определялись $f_i(t) = u_i(d(t), t), i = 1,2$, либо для задачи (19)–(22) $f\ (t) = u(d(t), t)$. Затем функции $f_i(t)$ возмущались $f_{i\delta}(t) = f_i(t) + \varepsilon\, s(t)$, где $s(t)$ случайная величина, равномерно распределенная на $[-1,1]$, $\varepsilon = 0.02$ – погрешность эксперимента. Функции $f_{i\delta}(t)$ использовались как исходная информация для решения обратных задач 1–4 предложенными методами. Для задач 1, 2 были взяты функции $d(t) = 1. - 0.05t$, $\mu_1(t) = 2t/(1+t), \mu_2(t) = 3t/(1+2t)$, для задач 3, 4 были взяты функции $d(t) = 1. - 0.1t$, $\mu(t) = 1 - (t - 0{,}8)^2 / 0.64$ для $t \le 0.8$ и $\mu(t) = 1$ для $t > 0.8$, $D=0.5$, а параметры были равны: $T=1$, число параметров в многочлене Бернштейна равно $N=8$. На рис.1 приведены результаты восстановления функции $\psi(\xi) = \xi/(6 - 5\xi)$ для задачи (5)–(8), (12). На рис.2 приведены результаты восстановления функции $p(\xi) = 1 - 0.3\dfrac{10\xi}{1+9\xi}$ для задачи (5)–(8), (12). На рис.3 приведены результаты восстановления функции $\psi(\xi) = \xi/(10 - 9\xi)$ для задачи 3. На рис.4 приведены результаты восстановления функции $\delta(\xi) = 1 - 0.5\dfrac{9\xi}{1+8\xi}$ для задачи 4. Кривые 1 соответствует точным данным, 2 – начальному приближению, 3 – восстановленным градиентным методом. Приведенные результаты показывают эффективность предложенного алгоритма решения этой обратной задачи.

рис.1

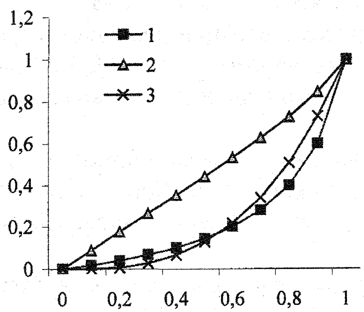


рис.2

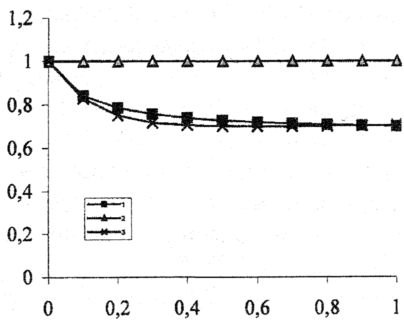


рис.3

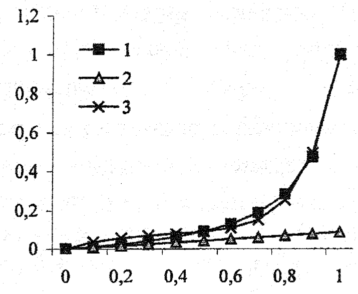
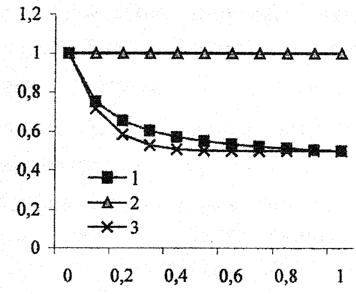


рис.4



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. Туйкина С.Р. Обратные задачи для одной математической модели ионообмена в случае сжимаемости ионита //Прикладная математика и информатика.,М.:Изд–во факультета ВмиК МГУ. 2001. № 7.С.73–81.
5. A.M. Denisov, V.A. Leshchenko Uniqueness theorems for problems of detetminibg the coefficients in nonlinear systems of equations of sorption dynamics. // J.Inv. Ill–Posed Problems, 1994, Vol.2, No. 1, pp. 15–32
6. Туйкина С.Р. Определение коэффициентов сорбции решением обратной задачи //Математическое моделирование.1997. Т. 9. №8.С.95–104.
7. Денисов А.М.,Лукшин А.В. Математические модели однокомпонентной динамики сорбции. М.:1989.
8. 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.
9. Денисов А.М., Туйкина С.Р. О некоторых обратных задачах неравновесной динамики сорбции //ДАН СССР.1984.276, №1.С.100–102.