ВМК

Методы математического моделирования, автоматизация обработки наблюдений и их применения

ИЗДАТЕЛЬСТВО
МОСКОВСКОГО
УНИВЕРСИТЕТА

МЕТОДЫ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ, АВТОМАТИЗАЦИЯ ОБРАБОТКИ НАБЛЮДЕНИЙ И ИХ ПРИМЕНЕНИЯ

СБОРНИК ТРУДОВ ФАКУЛЬТЕТА
ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ МАТЕМАТИКИ
И КИБЕРНЕТИКИ
МОСКОВСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО
УНИВЕРСИТЕТА

Под редакцией акад. А. Н. ТИХОНОВА,
акад. А. А. САМАРСКОГО

ИЗДАТЕЛЬСТВО
МОСКОВСКОГО УНИВЕРСИТЕТА
1986

УДК 516.6

Методы математического моделирования, автоматизация обработки наблюдений и их применения: Сборник / Под ред. А. Н. Тихонова, А. А. Самарского. — М.: Изд-во МГУ, 1986.— 280 с.

В сборник вошли работы по развитию методов регуляризации для решения некорректно поставленных задач и использованию этих методов в обратных задачах обработки и интерпретации наблюдений. Цикл работ посвящен численным методам решения прямых и обратных задач математической физики применительно к электродинамике и геофизике. Рассмотрены вопросы математического моделирования в физике плазмы: МГД-процессы в высокотемпературной плазме, исследование временной эволюции в токамаке и др.

Для специалистов в области вычислительной математики, математической физики, автоматизации обработки наблюдений.

Рецензенты:

проф. *А. Г. Свешников,*
д-р физ.-мат. наук *А. Г. Сухарев*

Печатается по постановлению
Редакционно-издательского совета
Московского университета

М $\frac{1502000000-064}{077(2)-86}$ 16—86

СОДЕРЖАНИЕ

Раздел I

МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ ОБРАТНЫХ ЗАДАЧ И ТЕОРИЯ РЕГУЛЯРИЗАЦИИ

А. М. Денисов, С. Р. Туйкина

О РЕШЕНИИ НЕКОТОРЫХ ОБРАТНЫХ ЗАДАЧ НЕРАВНОВЕСНОЙ ДИНАМИКИ СОРБЦИИ

При исследовании процессов динамики сорбции значительный интерес представляет решение обратных задач, в частности определение изотермы сорбции по выходной кривой. В первой части статьи доказываются теоремы единственности этой обратной задачи в случае моделей неравновесной динамики сорбции [1], а во второй рассматриваются вопросы ее численного решения.

§ 1. Единственность решения обратных задач неравновесной динамики сорбции

1°. Рассмотрим модель неравновесной динамики сорбции в случае внутридиффузионной кинетики [2] с учетом продольной диффузии:

$$\nu u_x + u_t + a_t = D u_{xx},\ 0<x<l,\ 0<t\leqslant T, \tag{1}$$

$$a_t = \beta(\varphi(u) - a), \tag{2}$$

$$u(0,\ t) = \mu(t),\ u(l,\ t) + \lambda u_x(l,\ t) = 0,\ 0<t\leqslant T, \tag{3}$$

$$u(x,\ 0) = 0,\ a(x,\ 0) = 0,\ 0\leqslant x\leqslant l. \tag{4}$$

Здесь $u(x,\ t)$ — концентрация газа в порах сорбента; $a(x,\ t)$ — в сорбенте, $\varphi(\xi)$ — изотерма сорбции, ν — средняя скорость потока газа, D — коэффициент продольной диффузии, β — внутридиффузионный коэффициент, а $\mu(t)$ — подаваемая входная концентрация. Константы ν, D, β и λ положительны.

Введем обозначения $Q_T = \{(x,\ t) : 0<x<l,\ 0<t\leqslant T\}$, $Q_{Tl} = \{(x,\ t) : 0<x\leqslant l,\ 0<t\leqslant T\}$, $Q_T{}^0 = \{(x,\ t) : 0\leqslant x\leqslant l,\ 0<t\leqslant T\}$, $\bar{Q}_T$ — замыкание Q_T.

Предположим, что

$$\mu(t)\in C^1[0,\ T],\ \mu(0) = \mu'(0) = 0,\ \mu(t)>0,\ \mu'(t)\geqslant 0 \text{ для } t>0, \tag{5}$$

$$\varphi(\xi)\in C^1(-\infty,\ \infty),\ \varphi'(\xi)>0 \text{ для } \xi\in(-\infty,\ \infty) \text{ и } \varphi(0)=0. \tag{6}$$

Решением задачи (1)—(4) назовем пару функций $u(x,\ t)$, $a(x,\ t)$, таких, что

$$u(x,\ t),\ u_t(x,\ t),\ a(x,\ t),\ a_t(x,\ t) \in C[\overline{Q}_T],$$
$$u_x(x,\ t),\ u_{tx}(x,\ t) \in C[Q_{Tl}], \tag{7}$$
$$u_{xx}(x,\ t),\ u_{tt}(x,\ t) \in C[Q_T],$$

$u(x,\ t)$, $a(x,\ t)$ удовлетворяют уравнению (1) в Q_T, уравнению (2) в $Q_T{}^0$ и условиям (3), (4).

Лемма 1. Если $u(x,\ t)$, $a(x,\ t)$ — решение задачи (1)—(4), то для любого $t_1 \in (0,\ T]$ в области $\overline{Q}_{t_1}$ $(Q_{t_1} = (0,\ l) \times (0,\ t_1])$

$$0 \leqslant u(x,\ t) \leqslant \mu(t_1), \tag{8}$$

$$0 \leqslant a(x,\ t) \leqslant \varphi(\mu(t_1)). \tag{9}$$

Доказательство. Функция $v(x,\ t) = e^{-\omega t} u(x,\ t)$ $(\omega > 0)$ удовлетворяет уравнению

$$\nu v_x + v_t + a_t e^{-\omega t} + \omega v - D v_{xx} = 0. \tag{10}$$

Пусть в точке $(x_0,\ t_0) \in Q_{t_1}$ достигается отрицательный минимум $v(x,\ t)$ в области Q_{t_1}. Тогда из уравнения (10) имеем

$$a_t(x_0,\ t_0) > 0. \tag{11}$$

Интегрируя (2) с условием $a(x,\ 0) = 0$, получим

$$a\,(x,\ t) = \beta \int\limits_0^t e^{\beta(\xi - t)} \varphi\,(u\,(x,\ \xi))\,d\xi. \tag{12}$$

$$\text{Следовательно, } a_t\,(x_0,\ t_0) = \beta\,(\varphi\,(u\,(x_0,\ t_0)) - \beta \int\limits_0^{t_0} e^{\beta(\xi - t_0)} \varphi\,(u\,(x_0,\ \xi))\,d\xi).$$

Так как $u(x_0,\ \xi) > u(x_0,\ t_0)$ для $\xi < t_0$, то

$$a_t\,(x_0,\ t_0) \leqslant \beta\varphi\,(u\,(x_0,\ t_0))\,e^{-\beta t_0}.$$

Но по предположению $u(x_0,\ t_0) < 0$ и из последнего неравенства следует $a_t(x_0,\ t_0) < 0$, что противоречит (11). Следовательно, отрицательного минимума у $v(x,\ t)$ в области $\overline{Q}_{t_1}$ нет. Таким образом, $u(x,\ t) \geqslant 0$ в $\overline{Q}_{t_1}$ и из (12) имеем $a(x,\ t) \geqslant 0$ в $\overline{Q}_{t_1}$.

Аналогично можно показать, что $v(x,\ t)$ не достигает положительного максимума в $\overline{Q}_{t_1}$. Тогда, используя произвольность числа ω, получим $u(x,\ t) \leqslant \mu(t_1)$ в $\overline{Q}_{t_1}$ и, учитывая представление (12), имеем $a(x,\ t) \leqslant \varphi(\mu(t_1))$ в $\overline{Q}_{t_1}$. Лемма 1 доказана.

Предположим, что функция $\varphi(\xi)$ удовлетворяет условиям (6), а

$$\varphi''(\xi) \text{ непрерывна и неположительна } \xi \in [0,\ \mu(T)]. \tag{13}$$

Лемма 2. Если $u(x,\ t)$, $a(x,\ t)$ — решение задачи (1)—(4), то существует $\tau > 0$, такое, что

$$u_t(x,\ t) \geqslant 0,\ a_t(x,\ t) \geqslant 0 \text{ в } \overline{Q}_\tau \text{ и } u_t(x,\ t) > 0 \text{ в } Q_\tau.$$

Доказательство. Обозначим $z(x,\ t) = u_t(x,\ t)$ и $w(x,\ t) = a_t(x,\ t)$. Из неравенства (8), (9) следует, что $z(x,\ 0) = 0$ и

$w(x, 0)=0$. Функции $z(x, t)$ и $w(x, t)$ являются решением краевой задачи

$$\nu z_x+z_t+w_t=Dz_{xx},\quad 0<x<l,\quad 0<t\leqslant T, \tag{14}$$

$$w_t=\beta(\varphi'(u)z-w), \tag{15}$$

$$z(0, t)=\mu'(t),\quad z(l, t)+\lambda z_x(l, t)=0,\quad 0<t\leqslant T,$$

$$z(x, 0)=0,\quad w(x, 0)=0,\quad 0\leqslant x\leqslant l.$$

Выберем τ из условия $\varphi'(\mu(\tau))/(\beta\tau)=\varphi'(0)$, если $\varphi'(\mu(T))/\beta T\leqslant \leqslant\varphi'(0)$, а в противном случае положим $\tau=T$.

Рассмотрим функцию $v(x, t)=e^{-\omega t}z(x, t)$ и покажем, что в области Q_τ она не имеет отрицательного минимума. Пусть точка (x_0, t_0) является точкой отрицательного минимума $v(x, t)$. Тогда из уравнения (14) имеем

$$w_t(x_0, t_0)>0. \tag{16}$$

Из уравнения (15) получим

$$w_t(x_0, t_0)=\beta\Big[\varphi'(u(x_0, t_0))z(x_0, t_0)-\beta\int\limits_0^{t_0} e^{-\beta(t_0-\xi)}\varphi'(u(x_0, \xi))\times$$

$$\times z(x_0, \xi)\,d\xi\Big].$$

Так как $z(x_0, t_0)<z(x_0, \xi)$, $\xi\in[0, t_0)$, и $\varphi'(u(x_0, t_0))>\varphi'(\mu(\tau))$, то

$$w_t(x_0, t_0)\leqslant\beta^2 z(x_0, t_0)\int\limits_0^{t_0}[\varphi'(\mu(\tau))/\beta t_0-\varphi'(u(x_0, \xi))]\,d\xi.$$

Учитывая определение числа τ, получим

$$w_t(x_0, t_0)\leqslant\beta^2 z(x_0, t_0)\int\limits_0^{t_0}[\varphi'(0)-\varphi'(u(x_0, \xi))]\,d\xi\leqslant 0,$$

что противоречит (16). Следовательно, в области Q_τ у функции $v(x, t)$ отрицательного минимума нет. Таким образом,

$$v(x, t)\geqslant 0 \text{ в } \bar{Q}_\tau \text{ и } z(x, t)\geqslant 0 \text{ в } \bar{Q}_\tau.$$

Покажем, что $w(x, t)\geqslant 0$ в $\bar{Q}_\tau$. Предположим, что (x_1, t_1) — точка отрицательного минимума $w(x, t)$. Тогда из уравнения (15) имеем

$$w_t(x_1, t_1)+\beta w(x_1, t_1)=\beta\varphi'(u(x_1, t_1))z(x_1, t_1).$$

Если (x_1, t_1) — точка отрицательного минимума $w(x, t)$, то левая часть последнего равенства отрицательна, а правая больше или равна 0. Из полученного противоречия следует, что $w(x, t)\geqslant 0$ в $\bar{Q}_\tau$. Покажем теперь, что $z(x, t)>0$ в $\bar{Q}_\tau$. Функция $z(x, t)$ в области $\bar{Q}_\tau$ обладает следующими свойствами:

$$Dz_{xx}-\nu z_x-\beta\varphi'(u)z-z_t=-\beta w\leqslant 0 \text{ и } z(x, t)\geqslant 0.$$

Предположим, что в некоторой точке $(x_0, t_0)\in\bar{Q}_\tau$ $z(x_0, t_0)=0$. Тогда, применяя теорему 5 гл. 2 из [3]. получим $z(x, t)\equiv 0$ в $\bar{Q}_{t_0}$, что противоречит условию $\mu(t)>0$ при $t>0$. Следовательно, $z(x, t)>0$ в Q_τ, и лемма доказана.

Замечание. Легко видеть, что полностью условия гладкости решения, входящие в (7), используются только при доказательстве леммы 2.

Рассмотрим следующую обратную задачу. Пусть функция $\mu(t)$ и параметры ν, D, β, λ в задаче (1)—(4) известны и задана функция $\gamma(t)$:

$$u(x^*, t)=\gamma(t), \ x^*\in(0, l], \ 0<t\leqslant T. \tag{17}$$

Требуется определить изотерму $\varphi(\xi)$.

Решением обратной задачи (1)—(4), (17) назовем тройку функций $\{u(x, t), a(x, t), \varphi(\xi)\}$, таких, что $u(x, t)$ и $a(x, t)$ удовлетворяют условиям (7); $\varphi(\xi)$ удовлетворяет (6), (13) и аналитична на интервале, содержащем отрезок $[0, \mu(T)]$; $u(x, t)$, $a(x, t)$, $\varphi(u(x, t))$ удовлетворяют (1) в Q_T, (2) в $Q_T{}^0$ и условиям (3), (4), (17).

Теорема 1. Если $\{u_1(x, t), a_1(x, t), \varphi_1(\xi)\}$ и $\{u_2(x, t), a_2(x, t), \varphi_2(\xi)\}$ — решения обратной задачи (1)—(4), (17), то $u_1(x, t)=u_2(x, t)$, $a_1(x, t)=a_2(x, t)$ в $\bar{Q}_T$ и $\varphi_1(\xi)=\varphi_2(\xi)$ для $\xi\in[0, M]$ $(M=\mu(T))$.

Доказательство. Рассмотрим функции $\alpha(x, t)=u_1(x, t)-u_2(x, t)$, $b(\xi)=\varphi_1(\xi)-\varphi_2(\xi)$,

$$p(x, t)=\int_0^1 \varphi_1'(u_1(x, t)+\theta(u_2(x, t)-u_1(x, t)))\,d\theta.$$

Функция $\alpha(x, t)$ является решением задачи

$$\alpha_t+\nu\alpha_x-D\alpha_{xx}+\beta p(x, t)\alpha-\beta^2\int_0^t e^{-\beta(t-\xi)}p(x, \xi)\,\alpha(x, \xi)\,d\xi=$$

$$=-\beta b(u_2(x, t))+\beta^2\int_0^t e^{-\beta(t-\xi)}b(u_2(x,\xi))\,d\xi\equiv f(x, t), \tag{18}$$

$$\alpha(0, t)=0, \ \alpha(l, t)+\lambda\alpha_x(l, t)=0, \quad 0<t\leqslant T, \tag{19}$$

$$\alpha(x, 0)=0, \ 0\leqslant x\leqslant l. \tag{20}$$

Можно показать, что для $\alpha(x, t)$ в области Q_T имеют место оценки

$$c_1\min\{0, \min_{Q_T} f(x, t)\}\leqslant\alpha(x, t)\leqslant C_2\max\{0, \max_{Q_T} f(x, t)\}, \tag{21}$$

где c_1, $c_2>0$ — некоторые постоянные.

Функции $\varphi_1(\xi)$ и $\varphi_2(\xi)$ аналитичны и $\varphi_1(0)=\varphi_2(0)$. Если существует отрезок $[0, \xi_1]$, на котором $\varphi_1(\xi)=\varphi_2(\xi)$, то $\varphi_1(\xi)\equiv\varphi_2(\xi)$ для $\xi\in[0, \mu(T)]$ и из оценки (21) $u_1(x, t)=u_2(x, t)$, $a_1(x, t)=a_2(x, t)$ в $\bar{Q}_T$.

Рассмотрим другой случай: $\varphi_1(\xi)>\varphi_2(\xi)$ (для определенности) для $\xi\in(0, \xi_1)$. Тогда существует ξ_0, такое, что $b'(\xi)>0$ для $\xi\in(0, \xi_0)$. Пусть $\bar\tau$ — решение уравнения $\mu(\tau)=\xi_0$ (если $\xi_0>\mu(T)$, то $\bar\tau=T$). Обозначим через $\tau^*=\min\{\tau, \bar\tau\}$, где τ из леммы 2. Из лемм 1, 2 следует, что в Q_{τ^*} $u_2(x, t)\leqslant\xi_0$ и $u_2(x, t)>u_2(x, s)$ для $s<t$. Тогда из определения функции $f(x, t)$ следует, что $f(x, t)<0$ в Q_{τ^*}.

Покажем, что $\alpha(x, t)<0$. Действительно, из (21) следует, что $\alpha(x, t)\leqslant0$ в Q_{τ^*}. Следовательно, если в какой-то точке $(x_0, t_0)\in Q_{\tau^*}$ $\alpha(x_0, t_0)=0$, то это точка максимума $\alpha(x, t)$ в Q_{τ^*}. Но тогда, записывая в этой точке уравнение (18), мы получим в левой части величину неотрицательную, а в правой — отрицательную. Следовательно, $\alpha(x, t)<0$ в Q_{τ^*}, что противоречит условию теоремы $\alpha(x^*, t)\equiv0$. Таким образом, предположение $\varphi_1(\xi)>\varphi_2(\xi)$ неверно и теорема в случае $x^*<l$ доказана.

Рассмотрим случай $x^*=l$. Пусть $h(x, t)$ — решение задачи

$$h_t+\nu h_x-Dh_{xx}+\beta p(x, t)h=0, \quad l/2<x<l, \quad 0<t\leqslant\tau^*,$$
$$h(l/2, t)=\alpha(l/2, t), \; h(l, t)+\lambda h_x(l, t)=0, \; 0<t\leqslant\tau^*,$$
$$h(x, 0)=0, \; l/2\leqslant x\leqslant l.$$

Тогда в области $\{l/2\leqslant x\leqslant l, \; 0\leqslant t\leqslant\tau^*\}$ $\alpha(x, t)\leqslant h(x, t)\leqslant0$.

Предположим, что $h(l, t)\equiv0$ для $0\leqslant t\leqslant\tau^*$, тогда $h_x(l, t)\equiv0$ для $0\leqslant t\leqslant\tau^*$, и из [4] следует, что $h(x, t)\equiv0$ для $l/2\leqslant x\leqslant l$, $0\leqslant t\leqslant\tau^*$, что противоречит условию $h(l/2, t)=\alpha(l/2, t)<0$. Следовательно, существует $t^*\in(0, \tau^*]$, такое, что $h(l, t^*)<0$. Но тогда $\alpha(l, t^*)<0$, а это противоречит условию $\alpha(l, t)\equiv0$, и теорема доказана.

2°. Рассмотрим модель неравновесной динамики сорбции в случае внешнедиффузионной кинетики с учетом продольной диффузии. В этом случае уравнение (1) для функций $u(x, t)$ и $a(x, t)$ и условия (3), (4) остаются прежними, а уравнение (2) заменяется на следующее [5]:

$$a_t=\beta(u-\psi(a)), \tag{22}$$

где $\psi(\xi)$ — функция, обратная к изотерме $\bar\varphi(\xi)$.

Предположим, что $\mu(t)$ удовлетворяет условиям (5), а $\psi(\xi)$ такова, что

$$\psi(\xi)\in C^1(-\infty, \bar\varphi(\infty)), \; \psi'(\xi)>0 \text{ для } \xi(-\infty, \bar\varphi(\infty)) \text{ и } \psi(0)=0. \tag{23}$$

Решением задачи (1), (22), (3), (4) назовем пару функций $u(x, t)$, $a(x, t)$, удовлетворяющих условиям (7), уравнению (1) в Q_T, уравнению (22) в $Q_T{}^0$ и условиям (3), (4).

Лемма 3. Если $u(x, t)$ и $a(x, t)$ — решение задачи (1), (22), (3), (4), то для любого $t_1\in(0, T]$

$$0\leqslant u(x, t)\leqslant\mu(t_1), \; 0\leqslant a(x, t)\leqslant\bar\varphi(\mu(t_1)), \quad (x, t)\in\bar Q_{t_1}.$$

Доказательство. Рассмотрим $v(x, t)=e^{-\omega t}u(x, t)$. Предположим, что в точке $(x_0, t_0)\in Q_{t_1}$ достигается отрицательный минимум $v(x, t)$. Тогда $a_t(x_0, t_0)>0$ и из (22) следует, что $u(x_0, t_0)>\psi(a(x_0, t_0))$, а значит $a(x_0, t_0)<0$. Следовательно, существует точка $t_2\in(0, t_0)$, такая, что $a(x_0, t_2)=\min\limits_{t\in[0,t_0]} a(x_0, t)$. Тогда $\psi(a(x_0, t_2))<\psi(a(x_0, t_0))<u(x_0, t_0)$ и $u(x_0, t_2)-u(x_0, t_0)<<u(x_0, t_2)-\psi(a(x_0, t_2))=0$. Следовательно, и $u(x_0, t_2)<u(x_0, t_0)$, что противоречит предположению $v(x_0, t_0)=\min\limits_{Q_{t_1}} v(x, t)$. Таким образом, $u(x, t)\geqslant 0$ в $\overline{Q}_{t_1}$.

Аналогично можно показать, что $v(x, t)$ достигает максимума в $\overline{Q}_{t_1}$ при $x=0$, а затем, используя произвольность числа ω, получить, что

$$u(x, t)\leqslant\mu(t_1), \quad (x, t)\in\overline{Q}_{t_1}.$$

Пусть $a(x, t)$ достигает максимального значения в области $\overline{Q}_{t_1}$ в точке (x_0, t_0). Тогда $a_t(x_0, t_0)\geqslant 0$. Следовательно,

$$u(x_0, t_0)\geqslant\psi(a(x_0, t_0)) \text{ и } \max_{\overline{Q}_{t_1}} a(x,t)\leqslant\varphi(\mu(t_1)).$$

Покажем, что $a(x, t)\geqslant 0$ в $\overline{Q}_{t_1}$. Если (x_0, t_0) — точка отрицательного минимума функции $w(x, t)=e^{-\omega t}a(x, t)$, то $a_t(x_0, t_0)<0$. Тогда из (22) имеем $u(x_0, t_0)<\psi(a(x_0, t_0))$, и так как $a(x_0, t_0)<0$, то и $u(x_0, t_0)<0$, что противоречит предыдущему. Лемма доказана.

Предположим, что функция $\psi(\xi)$ удовлетворяет условиям (23),

$$\psi(\xi)\in C^2[0, \varphi(M)] \text{ и } \psi''(\xi)\geqslant 0 \text{ для } \xi\in[0, \overline{\varphi}(M)]. \tag{24}$$

Лемма 4. Если $u(x, t)$, $a(x, t)$ — решение задачи (1), (22), (3), (4), то $u_t(x, t)\geqslant 0$, $a_t(x, t)\geqslant 0$ в $\overline{Q}_T$ и $u_t(x, t)>0$, $a_t(x, t)>0$ в Q_T.

Доказательство. Обозначим $z(x, t)=u_t(x, t)$ и $w(x, t)=a_t(x, t)$. Функции z, w являются решением краевой задачи

$$\nu z_x+z_t-w_t=Dz_{xx}, \tag{25}$$

$$w_t=\beta(z-\psi'(a)w), \tag{26}$$

$$z(0, t)=\mu'(t),\ z(l, t)+\lambda z_x(l, t)=0,$$

$$z(x, 0)=0,\ w(x, 0)=0.$$

Покажем, что $z(x, t)\geqslant 0$ в Q_T. Допустим, что (x_0, t_0) — точка отрицательного минимума функции $v(x, t)=e^{-\omega t}z(x, t)$ $(\omega>0)$ в Q_T. Тогда из (25) получим $w_t(x_0, t_0)>0$, а из (26) $w(x_0, t_0)<0$. Пусть t_1 — ближайшая к t_0 точка локального минимума функции $w(x_0, t)$ на отрезке $[0, t_0]$. Тогда, используя уравнение (26), получим

$$z(x_0, t_1)=\psi'(a(x_0, t_1))w(x_0, t_1) \text{ и } z(x_0, t_1)<0.$$

Из определения t_1 следует, что $w(x_0, t)$ на отрезке $[t_1, t_0]$ отрицательна. Так как $\psi''(\xi)>0$, то $\psi'(a(x_0, t_1))\geqslant\psi'(a(x_0, t_0))$, а значит, и $z(x_0, t_1) \leqslant z(x_0, t_0)$, что противоречит сделанному предположению. Следовательно, $v(x, t) \geqslant 0$ в $\bar{Q}_T$ и $z(x, t) \geqslant 0$ в $\bar{Q}_T$.

Предположив, что (x_0, t_0) — точка отрицательного минимума $w(x, t)$ в $\bar{Q}_T$, из уравнения (26) получим

$$0 \geqslant w_t(x_0, t_0) = \beta(z(x_0, t_0) - \psi'(a(x_0, t_0))w(x_0, t_0)).$$

Следовательно, $z(x_0, t_0) < 0$, что противиречит предыдущему.

Неравенство $z(x, t) > 0$ в Q_T доказывается аналогично лемме 2.

Докажем, что $w(x, t) > 0$ в Q_T. Предположим, что $w(x_0, t_0) = 0$. Следовательно, это точка минимума, и $w_t(x_0, t_0) \leqslant 0$. Тогда из (26) имеем $\psi'(a(x_0, t_0))w(x_0, t_0) \geqslant z(x_0, t_0) > 0$, что противоречит предположению. Лемма доказана.

Решением обратной задачи (1), (22), (3), (4), (17) назовем тройку функций $u(x, t)$, $a(x, t)$, $\psi(\xi)$, таких, что $u(x, t)$, $a(x, t)$ удовлетворяют условиям (7); $\psi(\xi)$ удовлетворяет (23), (24) и аналитична на интервале, содержащем отрезок $[0, \bar{\varphi}(M)]$; $u(x, t)$, $a(x, t)$, $\psi(a(x, t))$ удовлетворяют уравнению (1) в Q_T, уравнению (22) в $Q^0{}_T$ и условиям (3), (4), (17).

Т е о р е м а 2. Если $u_1(x, t)$, $a_1(x, t)$, $\psi_1(\xi)$ и $u_2(x, t)$, $a_2(x, t)$, $\psi_2(\xi)$ — решения обратной задачи (1), (22), (3), (4), (17), то $u_1(x, t) = u_2(x, t)$, $a_1(x, t) = a_2(x, t)$ в $\bar{Q}_T$ и $\psi_1(\xi) = \psi_2(\xi)$ для $\xi \in [0, \bar{\varphi}(M)]$.

Д о к а з а т е л ь с т в о. Рассмотрим функции $\alpha(x, t) = u_1(x, t) - u_2(x, t)$, $b(\xi) = \psi_1(\xi) - \psi_2(\xi)$ и $p(x, t) = \int\limits_0^1 \psi_1'(a_1(x, t) + \theta(a_2(x, t) - a_1(x, t)))\,d\theta$. Функция $\alpha(x, t)$ является решением

$$\alpha_t - D\alpha_{xx} + \nu\alpha_x + \beta\alpha - \beta^2 p(x, t)\int\limits_0^t \alpha(x, \xi)\exp\left[-\beta\int\limits_\xi^t p(x, s)\,ds\right]d\xi = f(x, t), \tag{27}$$

$$\alpha(0, t) = 0,\ \alpha(l, t) + \lambda\alpha_x(l, t) = 0,\ \alpha(x, 0) = 0,$$

где

$$f(x, t) = \beta b(a_2(x, t)) - \beta^2 p(x,t)\int\limits_0^t b(a_2(x, \xi))\exp\left[-\beta\int\limits_\xi^t p(x, s)\,ds\right]d\xi.$$

Для $\alpha(x, t)$ в $\bar{Q}_\tau$ справедлива оценка

$$c_1\min\{0, \min_{Q_\tau} f(x, t)\} \leqslant \alpha(x, t) \leqslant c_2\max\{0, \max_{Q_\tau} f(x, t)\},\ 0 < \tau \leqslant T. \tag{28}$$

Предположим (для определенности), что $\psi_1'(\xi) > \psi_2'(\xi)$ для $\xi < \xi_0$. Тогда на интервале $(0, \xi_0)$ функция $b(\xi)$ монотонно возрастает. Выберем τ^* так, что $\bar{\varphi}(\mu(\tau^*)) = \xi_0$ (в случае $\bar{\varphi}(\mu(T)) < \xi_0$ $\tau^* = T$). Тогда в области Q_{τ^*} $a_2(x, t) \leqslant \xi_0$, $b(a_2(x, t)) > 0$, $b(a_2(x, t)) > b(a_2(x, t))$ для $t > \tau$. Следовательно, в Q_{τ^*}

$$f(x, t) > \beta b(a_2(x, t))\{1-\beta t \max_{Q_{\tau^*}} p(x, t)\}$$

и существует $\bar{\tau} \in (0, \tau^*)$, такое, что в $Q_{\bar{\tau}}$ $f(x, t)>0$. Тогда из оценки (28) имеем $\alpha(x, t) \geqslant 0$ в $Q_{\bar{\tau}}$.

Покажем, что $\alpha(x, t)>0$ в $Q_{\bar{\tau}}$. Предположим, что $\alpha(x_0, t_0)=0$, где $(x_0, t_0) \in Q_{\bar{\tau}}$. Тогда точка (x_0, t_0) — точка минимума $\alpha(x, t)$ и $\alpha_t(x_0, t_0) \leqslant 0$, $\alpha_{xx}(x_0, t_0) \geqslant 0$, $\alpha_x(x_0, t_0)=0$. Рассматривая уравнение (27) в точке (x_0, t_0), мы получим в левой части значение, меньшее или равное нулю, а в правой $f(x_0, t_0)>0$. Следовательно, $\alpha(x, t)>0$ в $Q_{\bar{\tau}}$, что противоречит условию $\alpha(x^*, t) \equiv 0$, и теорема в случае $x^*<l$ доказана. Для $x^*=l$ доказательство проводится аналогично теореме 1.

§ 2. Численное решение обратных задач

Рассмотрим задачу определения изотермы сорбции по выходной кривой $u(l, t)$, предполагая, что она известна с некоторой погрешностью.

Остановимся на случае внутридиффузионной кинетики. При изучении процессов динамики сорбции широко используется класс выпуклых вверх изотерм, т. е. предполагается, что изотерма $\varphi(\xi)$ удовлетворяет условиям

$$\varphi''(\xi) \leqslant 0 \text{ для } \xi \in [0, 1], \ \varphi(0)=0, \ \varphi(1)=1, \ \varphi'(1) \geqslant 0, \ \varphi'(0) \leqslant M. \tag{29}$$

Здесь приняты следующие условия нормировки: $\mu(T)=1$, $\varphi(1)=1$.

Решение обратной задачи будем искать в виде некоторой заданной функции, зависящей от неизвестных параметров $\varphi(\xi, \bar{g})$, где вектор параметров $\bar{g}$ принадлежит некоторому конечномерному пространству. Поскольку мы рассматриваем класс изотерм Φ, определяемый условиями (29), то естественно потребовать, чтобы функции $\varphi(\xi, \bar{g})$ принадлежали этому классу. Будем требовать также, чтобы функции $\varphi(\xi, \bar{g})$ были плотны в классе Φ, т. е. для любой $\tilde{\varphi} \in \Phi$ и любого $\varepsilon>0$ найдется такой вектор параметров $\bar{g}$, принадлежащий некоторому конечномерному пространству, что $\|\tilde{\varphi}(\xi)-\varphi(\xi, \bar{g})\|_{C[0,1]} \leqslant \varepsilon$. Сформулированные на функцию $\varphi(\xi, \bar{g})$ требования будут выполнены, если мы в качестве $\varphi(\xi, \bar{g})$ возьмем многочлен Бернштейна [6]:

$$\varphi(\xi, \bar{g}) = \sum_{i=0}^{N+1} g_i C_N^i \xi^i (1-\xi)^{N-i}, \tag{30}$$

где $g_0=0$, $g_{N+1}=1$, а g_i удовлетворяют следующим условиям:

$$\begin{gathered} g_{i-1}-2g_i+g_{i+1} \leqslant 0 \text{ для } 1 \leqslant i \leqslant N, \\ g_N \leqslant g_{N+1}, \quad g_1 \leqslant M/(N+1). \end{gathered} \tag{31}$$

Неравенства (31) определяют в пространстве E^N ограниченное множество G^N.

Задачу определения изотермы можно рассматривать как задачу решения операторного уравнения $A\varphi=u(l, t)$, где A — оператор, ставящий в соответствие изотерме $\varphi(\xi)$ выходную кривую $u(l, t)$ и определяемый краевой задачей (1)—(4). Оператор A непрерывен из $C[0, 1]$ в $C[0, T]$.

Пусть точная правая часть операторного уравнения нам неизвестна, а задана функция $u_\delta(t)$, такая, что $\|u(l,t)-u_\delta(t)\|_{L_2[0,T]}\leqslant\delta$. В качестве приближенного решения мы можем рассматривать функции $\varphi(\xi, \tilde{g}_\delta)$ $(\tilde{g}_\delta\in G^N)$, такие, что

$$\|A\varphi(\xi, \tilde{g}_\delta)-u_\delta(t)\|_{L_2[0,T]}\leqslant c\delta,\ c=\text{const}>1. \tag{32}$$

Действительно, предполагая, что точное решение задачи $\bar{\varphi}(\xi)$ представимо в виде $\bar{\varphi}(\xi)=\varphi(\xi, \bar{g})$, и учитывая единственность решения обратной задачи, мы получим, что при $\delta\to 0$ векторы $\tilde{g}_\delta$ будут сходиться к $\bar{g}$ в метрике пространства E^N, а $\varphi(\xi, \tilde{g}_\delta)$ — к $\varphi(\xi, \bar{g})$ в метрике $C[0, 1]$.

В качестве элемента, являющегося решением неравенства (32), будем брать приближенное решение $\varphi(\xi, g_M)$ вариационной задачи

$$\min_{g\in E^N} S(g),\ \text{где}\ S(g)=\int_0^T[A\varphi(\xi, g)-u_\delta(t)]^2dt,$$

с критерием (32) для окончания процесса минимизации. Для решения этой задачи минимизации можно использовать градиентные методы. Градиент функции $S(g)$ представим в виде

$$S(g_i)=\iint_{Q_T}\beta\varphi u g_i(\xi-\psi)\,dxdt,\ i=1, \dots N,$$

где функции $\xi(x, t)$ и $\psi(x, t)$ — это решение следующей краевой задачи:

$$\psi_t=-D\psi_{xx}-\nu\psi_x+\beta\varphi'(u)\psi-\beta\varphi'(u)\xi,\quad 0<x<l,\quad 0\leqslant t<T,$$
$$\xi_t=\beta(\xi-\psi),\quad 0\leqslant x\leqslant l,\quad 0\leqslant t<T,$$
$$\psi(0, t)=0,\quad 0\leqslant t<T,$$
$$D\psi_x(l, t)+(\nu+D/\lambda)\psi(l, t)=2(u(l, t)-u_\delta(t)),\quad 0\leqslant t<T,$$
$$\psi(x, T)=0,\qquad \xi(x, T)=0,\quad 0\leqslant x\leqslant l.$$

Для минимизации функции $S(g)$ на множестве G^N можно использовать метод условного градиента.

Аналогично строится метод приближенного решения обратной задачи в случае внешнедиффузионной кинетики. Неизвестной функцией в данном случае является $\psi(\xi)$ (обратная к изотерме) из множества функций Ψ, определяемого аналогично (1).

Приведем примеры решения модельных задач с использованием рассмотренного метода. В случае внутридиффузионной кинетики в качестве «исходной» рассматривалась изотерма Лэнгмюра $\varphi_a(\xi) = a\xi/(1+(a-1)\xi)$, а в случае внешнедиффузионной кинетики — к ней обратная, $\psi_a(\xi) = \xi/(a-(a-1)\xi)$. Для них решались задачи (1)—(4) и определялись $u(l, t)$. В эти «исходные данные» вносилась погрешность, и по функции $u_\delta(l)$ восстанавливалась изотерма.

В краевых задачах были выбраны следующие параметры:

$$\nu=5, \quad D=0{,}5, \quad \beta=10, \quad N=5, \quad a=3,$$

$$\mu(t) = \begin{cases} 1-4(t-0{,}5)^2 & \text{для } 0 < t \leqslant 0{,}5, \\ 1 & \text{для } 0{,}5 < t \leqslant 1. \end{cases}$$

Вносимая погрешность $\delta=0{,}01$.

В таблице приведены результаты решения обратных задач. ψ_M и φ_M — это приближенные решения, норма $\|\varphi_a-\varphi\|_{C[0,1]}$ обозначена $S1$, а норма $\|u(l, t, g)-u_\delta(t)\|_{L_2[0, T]}$ обозначена S.

Для внутридиффузионной кинетики в качестве начального приближения был взят вектор параметров $g_i=5i/(6+4i)$, $i=1, \ldots, 5$, а для внешнедиффузионной кинетики $g_i=i/(12-i)$, $i=1, \ldots, 5$.

Таблица

ξ	$\psi_э(\xi)$	$\psi_M(\xi)$	$\varphi_э(\xi)$	$\varphi_M(\xi)$
0,	0,	0,	0,	0,
0,067	0,023	0,025	0,176	0,174
0,133	0,049	0,052	0,316	0,317
0,200	0,077	0,080	0,429	0,436
0,267	0,108	0,111	0,522	0,533
0,333	0,143	0,145	0,600	0,613
0,400	0,182	0,182	0,667	0,679
0,467	0,226	0,222	0,724	0,735
0,533	0,276	0,268	0,774	0,781
0,600	0,333	0,321	0,818	0,821
0,667	0,4	0,383	0,857	0,854
0,733	0,478	0,458	0,892	0,885
0,800	0,571	0,551	0,923	0,914
0,867	0,684	0,667	0,951	0,941
0,933	0,824	0,814	0,977	0,969
1,	1,	1,	1,	1,
S_1	—	0,021	—	0,013
S	—	0,010	—	0,011

ЛИТЕРАТУРА

1. Денисов А. М., Туйкина С. Р. О некоторых обратных задачах неравновесной динамики сорбции. — ДАН СССР, 1984, т. 276, с. 100—102.

2. Золотарев П. П., Калиничев А. И. О стационарной стадии неравновесной динамики сорбции. — ДАН СССР, 1971, т. 199, с. 1098—1100.

3. Фридман А. Уравнения с частными производными параболического типа. — М.: Мир, 1968.

4. Ландис Е. М. Некоторые вопросы качественной теории эллиптических и параболических уравнений. — УМН, 1959, т. 14, № 1, с. 21—83.
5. Тихонов А. Н., Жуховицкий А. А., Забежинский Я. Л. Поглощение газа из тока воздуха слоем зернистого материала. II. — ЖФХ, 1946, т. 20, вып. 10, с. 1113—1126.
6. Березин И. С., Жидков Н. П. Методы вычислений. Т. 1. — М.: Наука, 1966.

Ф. П. Васильев

О РЕГУЛЯРИЗАЦИИ МЕТОДА СТЕФФЕНСЕНА ПРИ НЕТОЧНОМ ЗАДАНИИ ИСХОДНЫХ ДАННЫХ

Рассмотрим задачу минимизации

$$J(u) \to \inf, \quad u \in H, \tag{1}$$

где H — вещественное гильбертово пространство. Задача (1) является, вообще говоря, некорректной в норме H, и для ее решения нужно применять методы регуляризации [1, 2]. В частности, здесь могут быть применены методы, получаемые регуляризацией известных методов минимизации. Ниже предлагается и исследуется регуляризация метода Стеффенсена [3] при условии, когда минимизируемая функция (1) и ее производные известны неточно.

Пусть $\langle u, v\rangle$ — скалярное произведение в H; $\|u\| = \langle u, u\rangle^{1/2}$ — норма в H; $\mathscr{L}(H \to H)$ — пространство линейных ограниченных операторов, отображающих H в H; $J'(u)$, $J''(u)$ — первая и вторая производные Фреше функции $J(u)$; $J'(u, v)$ — разделенная разность первой производной, определяемая условиями

$$J'(u, v) \in \mathscr{L}(H \to H), \quad J'(u, u) = J''(u),$$
$$J'(u, v)(u - v) = J'(u) - J'(v), \quad u, v \in H.$$

Введем функцию Тихонова для задачи (1)

$$T_k(u) = J(u) + \alpha_k \|u\|^2, \quad \alpha_k > 0, \quad k = 0, 1, \ldots$$

Тогда

$$T_k'(u) = J'(u) + 2\alpha_k u, \quad T_k''(u) = J''(u) + 2\alpha_k E,$$
$$T_k'(u, v) = J'(u, v) + 2\alpha_k E,$$

где E — единичный оператор на H. В случае точно известных данных регуляризованный метод Стеффенсена имеет вид

$$u_{k+1} = u_k - (T_k'(u_k, x_k))^{-1} T_k'(u_k), \quad k = 0, 1, \ldots, \tag{2}$$

где $x_k = u_k - \beta_k T_k'(u_k)$, β_k — числовой параметр.

Пусть вместо точных $J'(u)$, $J''(u)$, $J'(u, v)$ известны лишь их приближения $J_k'(u)$, $J_k''(u)$, $J_k'(u, v)$. Тогда вместо точных $T_k'(u)$, $T_k''(u)$, $T_k'(u, v)$ будем иметь дело с их приближениями

$$t_k'(u) = J_k'(u) + 2\alpha_k u, \quad t_k''(u) = J_k''(u) + 2\alpha_k E,$$
$$t_k'(u, v) = J_k'(u, v) + 2\alpha_k E, \quad k = 0, 1, \ldots,$$

а метод (2) будет иметь вид

$$u_{k+1}=u_k-D_k t_k'(u_k), \qquad k=0,\ 1, \ldots, \tag{3}$$

где $D_k\in\mathscr{L}(H\to H)$ — приближение для $(t_k'(u_k,\ x_k))^{-1}$, $x_k=u_k-\beta_k t_k'(u_k)$.

Приведем условия согласования параметров α_k, β_k, начального приближения u_0 с погрешностями задания исходных данных, гарантирующие сильную сходимость последовательности $\{u_k\}$, определяемой методом (3), к нормальному решению задачи (1).

Теорема 1. Пусть: 1) функция $J(u)$ выпукла, дважды дифференцируема по Фреше на H; $J_*=\inf\limits_H J(u)>-\infty$, $U_*=\{u\in H: J(u)=J_*\}\neq\varnothing$, u_* — нормальное решение задачи (1), т. е. $u_*\in U_*$, $\|u_*\|=\inf\limits_{U_*}\|u\|$;

$$\|J'(u,\ v)-J'(v,\ w)\|\leqslant L(\|u-v\|+\|v-w\|), \tag{4}$$

$$L=\text{const}\geqslant 0,\ u,\ v,\ w\in H;$$

2) приближения $J_k'(u_k)$, $J_k'(u_k,\ x_k)$ для $J'(u_k)$, $J'(u_k,\ x_k)$, используемые в методе (3), таковы, что

$$\|J_k'(u_k)-J'(u_k)\|\leqslant\delta_{1k}(1+\|u_k\|), \tag{5}$$

$$\|J_k'(u_k,\ x_k)-J'(u_k,\ x_k)\|\leqslant\delta_{2k},\ k=0,\ 1,\ \ldots; \tag{6}$$

приближение D_k для обратного оператора $(t_k'(u_k,\ x_k))^{-1}$ удовлетворяет условию

$$\|D_k-(t_k'(u_k,\ x_k))^{-1}\|\leqslant\delta_{3k},\ k=0,\ 1,\ \ldots; \tag{7}$$

3) числовые последовательности $\{\alpha_k\}$, $\{\beta_k\}$, $\{\delta_{1k}\}$, $\{\delta_{2k}\}$, $\{\delta_{3k}\}$ таковы, что

$$\alpha_k>0,\ 1\leqslant\frac{\alpha_k}{\alpha_{k+1}}\leqslant 2,\ \alpha_k-\alpha_{k+1}\leqslant D\alpha_k^2,\ D=\frac{3^{-1}2^{-9}}{\|u_*\|(L+c)}, \tag{8}$$

$$\delta_{1k}\geqslant 0,\ 0\leqslant\delta_{2k}\leqslant\frac{\alpha_k}{2},\ \delta_{3k}\geqslant 0,\ \lim_{k\to\infty}(\alpha_k+\delta_{1k}+\delta_{2k})=0, \tag{9}$$

$$|\beta_k|\leqslant\frac{c}{L\alpha_k},\ \frac{c}{24(L+c)}\left(1+\frac{\delta_{1k}}{2\alpha_k}\right)+2c\,\frac{\delta_{1k}}{\alpha_k^2}(1+\|u_*\|)\leqslant 1, \tag{10}$$

$$24\left(\eta_k+\frac{\eta_k}{\alpha_k}+\frac{\delta_{1k}}{\alpha_k^3}\right)(2+\eta_k)^3(3+204L+288L^2)\times$$

$$\times\left(1+\frac{c}{L}\right)^2(1+\|u_*\|+\|J''(u_*)\|)^2\leqslant 1, \tag{11}$$

где $c=\text{const}>0$,

$$\eta_k=\frac{\delta_{1k}}{2\alpha_k}+\frac{\delta_{2k}}{\alpha_k}+\alpha_k\delta_{3k}+\frac{1}{2}\delta_{1k}\delta_{3k}; \tag{12}$$