

Евсеев А.Б.

ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ ОБРАТНОЙ НЕРАВНОВЕСНОЙ СОРБЦИОННОЙ ЗАДАЧИ С НЕСТАЦИОНАРНЫМ КРАЕВЫМ УСЛОВИЕМ

Рассмотрим задачу неравновесной динамики сорбции с внешнедиффузионной кинетикой, с учётом конвекции и продольной диффузии, с краевым условием первого рода и нестационарным краевым условием:

$$\nu u_x + u_t + a_t = Du_{xx}, \quad (x, t) \in Q_T; \quad (1)$$

$$a_t = \beta[u - \psi(a)], \quad (x, t) \in Q_T^0; \quad (2)$$

$$a(x, 0) = 0, \quad 0 \leq x \leq l; \quad (3)$$

$$u(x, 0) = \mu_0(x), \quad 0 \leq x \leq l; \quad (4)$$

$$u(0, t) = f_0(t), \quad 0 \leq t \leq T; \quad (5)$$

$$-u_t(l, t) = ku_x(l, t) + h[u(l, t) - f_l(t)], \quad 0 \leq t \leq T. \quad (6)$$

Здесь используются обозначения: $u(x, t)$, $a(x, t)$ – концентрации поглощаемой сорбентом примеси соответственно в потоке жидкости и в сорбенте; ν – скорость течения жидкости; D – эффективный коэффициент продольной диффузии; $\mu_0(x)$ – начальная концентрация примеси в потоке жидкости; $f_0(t)$, $f_l(t)$ – концентрации примеси во входном и выходном резервуаре; $\psi(\xi)$ – обратная функция к изотерме сорбции. Нестационарное условие (6) выражает баланс примеси в дополнительном фильтре, помещённом на выходной границе сорбционной области Q_T , где

$$Q_T = \{(x, t) : x \in (0, l), t \in (0, T)\}; \quad Q_{IT} = \{(x, t) : x \in (0, l), t \in (0, T)\}; \quad (7)$$

$$Q_T^0 = \{(x, t) : x \in [0, l], t \in (0, T)\}; \quad \overline{Q_T} = \{(x, t) : x \in [0, l], t \in [0, T]\}, \quad (8)$$

Задача рассматривается в классе функций $\psi(\xi)$, для которых предполагается следующее:

$$\psi(\xi) \in C^1(-\infty, \varphi(\infty)), \psi(0) = 0, 0 < \psi'(\xi) < \psi_0, \xi \in (-\infty, \varphi(\infty)); \quad (9)$$

$$\psi(\xi) \in C^2[0, \varphi(\infty)], \psi''(\xi) \geq 0, \xi \in [0, \varphi(\infty)]; \quad (10)$$

Обратная задача. Рассматривается следующая обратная задача: определить функцию $\psi(\xi)$, если положительные параметры ν , D , β , k , h и функции $\mu_0(x)$, $f_0(t)$, $f_l(t)$ в задаче (1)–(6) известны, $x^* \in (0, l)$ – фиксировано и задана функция

$$\gamma(t) \equiv u(x^*, t), \quad t \in [0, T]. \quad (11)$$

Численный метод решения обратной задачи. В обратной задаче восстанавливается функция $\psi(\xi)$, принадлежащая следующему классу:

$$P = \left\{ \psi(\xi) \in C^2[0, 1], \psi''(\xi) \leq 0, \xi \in [0; 1], \psi(0) = 0, \psi(1) = 1, \psi'(0) \geq \frac{1}{M}, \psi'(1) < \frac{1}{\alpha} \right\}.$$

Обратная задача может быть сформулирована как задача решения операторного уравнения $A\psi = u_\delta(t)$ с приближённо заданной правой частью. Оператор A определён задачей (1)–(6) и является непрерывным из $C[0, 1]$ в $C[0, T]$.

Для решения обратной задачи используется алгоритм построения и перебора элементов ε -сети компактного множества P . Можно показать, что ε -сеть P_N множества P состоит из элементов вида $p_w^N(\xi) = \xi - B_w^N(\xi)$, где многочлен равномерного приближения Бернштейна $B_w^N(\xi)$ строится по ломаным $w_N \in W_N$. Множество W_N состоит из всех выпуклых вниз ломаных с началом в $(0; 0)$ и концом в $(1; 0)$ и узлами, совпадающими с узлами равномерной сетки внутри треугольника Δ_ε , ограниченного прямыми:

$$y_1(\xi) = 0, \quad y_2(\xi) = \left(1 - \frac{1}{M}\right)\xi, \quad y_3(\xi) = \left(1 - \frac{1}{\alpha}\right)(\xi - 1).$$

Если обозначить через P_N^δ , множество функций из P_N , для которого верна оценка:

$$\|Ap_w^N - u_\delta\| \leq C\delta, \quad C = \text{const} > 0,$$

то из непрерывности оператора A имеем:

$$\forall \delta > 0 \exists N(\delta), \exists p_w^{N(\delta)} \in P_{N(\delta)} : \left\| p_w^{N(\delta)} - \psi \right\|_{C[0,1]} \rightarrow 0, \quad \delta \rightarrow 0, \quad N(\delta) \rightarrow \infty.$$

В качестве приближённого решения обратной задачи можно рассматривать элементы множества $P_{N(\delta)}^\delta$, где $N(\delta)$ – наименьшее, для которого $P_{N(\delta)}^\delta$ не пусто.

Алгоритм решения обратной задачи состоит в следующем:

1. Перебираются все выпуклые ломаные, построенные на плоскости (ξ, y) по равномерной двумерной сетке, расположенной внутри треугольника Δ_ε . Для каждой ломаной $\lambda_N(\xi)$ строится функция $p_w^N(\xi)$.

- Для этой функций $p_w^N(\xi)$ решается прямая задача – вычисляются значения функции $u(x, t)$ в узлах сетки $\omega_{\kappa, \tau}$. Вычисляются значения сеточной функции $\gamma(t_j) \equiv u(x^*, t_j)$.
- Далее строится дополнительная информация для обратной задачи: δ -приближение $\gamma_\delta(t_j)$ к функции

$$\gamma(t_j) \equiv u(x^*, t_j), \quad t_j = j\tau, \quad \tau = T/M$$

и где $x^* \in (0, l)$ – фиксированная точка.

- В качестве решения обратной задачи принимаются функции $p_w^N(\xi)$, которые, будучи подставленными в прямую задачу вместо исходной функции $\psi(\xi)$, дают наилучшее приближение решения прямой задачи к выходной кривой $\gamma_\delta(t)$.

Свойства разностной схемы для решения прямой задачи. Численное решение прямых задач ведётся методом разностных схем [1].

Введём вспомогательные обозначения: $i = \overline{0, N}$ означает следующее: N – натуральное, i – целое, $i = 0, 1, 2, \dots, N$.

В области Q_T введём равномерные сетки по переменным x, t :

$$\omega_\kappa = \{x_i = i\kappa, i = \overline{0, N}, N\kappa = l\},$$

$$\omega_\tau = \{t_j = j\tau, j = \overline{0, M}, M\tau = T\},$$

$$\omega_{\kappa, \tau} = \omega_\kappa \times \omega_\tau.$$

Для функций $y(x, t), d(x, t)$, определённых на сетке $\omega_{\kappa, \tau}$, будем пользоваться известными обозначениями:

$$y = y_i = y_i^j = y(x_i, t_j), d = d_i = d_i^j = a(x_i, t_j), \hat{y} = y_i^{j-1}, y_x = y_{x,i} = \frac{y_{i+1}^j - y_i^j}{\kappa}, \quad (12)$$

$$y_{xx} = y_{xx,i} = \frac{y_i^j - y_{i-1}^j}{\kappa}, y_t = y_{t,i} = \frac{y_i^j - y_i^{j-1}}{\tau}, y_{xx} = y_{xx,i} = \frac{y_{i-1}^j - 2y_i^j + y_{i+1}^j}{\kappa^2}. \quad (13)$$

Аппроксимируем краевую задачу (1)– (6) следующей разностной схемой. Уравнение (1) аппроксимируется чисто неявным разностным

уравнением. Для уравнения (6) счёт ведётся по явной схеме. Воспользуемся обозначениями (12)(13).

$$\nu y_{\bar{x},i} + y_{\bar{t},i} + \beta[y_i^j - \psi(d_i^{j-1})] = Dy_{\bar{x},i}, \quad i = \overline{1, N-1}, j = \overline{1, M}; \quad (14)$$

$$d_{\bar{t},i} = \beta[y_i^{j-1} - \psi(d_i^{j-1})], \quad i = \overline{0, N}, j = \overline{1, M}; \quad (15)$$

$$d_i^0 = 0, \quad i = \overline{0, N}; \quad (16)$$

$$y_i^0 = \mu_0(\kappa i), \quad i = \overline{0, N}; \quad (17)$$

$$y_0^j = f_0(\tau j), \quad j = \overline{1, M}; \quad (18)$$

$$-y_{\bar{t},N} = \kappa y_{\bar{x},N} + h[y_N - f_l(\tau j)], \quad j = \overline{1, M}. \quad (19)$$

Введём сеточные нормы:

$$\|y\|_{(1\kappa)} = \max_{0 \leq i \leq N} |y_i|, \quad \|y\|_{(2\kappa)} = \max_{0 < i < N} |y_i|, \quad \|y\|_{(3\tau)} = \max_{0 \leq j \leq j_0} |y^j|,$$

$$\|y\|_{(1\kappa, \tau)} = \max_{0 \leq j \leq j_0} \|y^j\|_{(1\kappa)},$$

Рассмотрим решение прямой краевой задачи (1)–(6) $\{u, a\}$ на сетке $\omega_{\kappa, \tau}$.

Решение разностной схемы (14) – (19) сходится к решению краевой задачи (1) – (6) со скоростью $O(\tau + \kappa)$, если оба неравенства $\|y - u\|_{(1\kappa, \tau)} \leq C(\tau + \kappa)$, $\|d - a\|_{(1\kappa, \tau)} \leq C(\tau + \kappa)$ выполняются для всех достаточно малых τ, κ и некоторого постоянного $C = const > 0$, не зависящего от τ, κ .

Перепишем разностную схему (14) – (19) в виде:

$$y_{\bar{t}} + \nu y_{\bar{x}} - Dy_{\bar{x}} + \beta[y - \psi(\hat{d})] = 0, \quad i = \overline{1, N-1}, j = \overline{1, M}; \quad (20)$$

$$d_{\bar{t}} = \beta[\hat{y} - \psi(\hat{d})], \quad i = \overline{0, N}, j = \overline{1, M}; \quad (21)$$

$$d_i^0 = 0, \quad i = \overline{0, N}; \quad (22)$$

$$y_i^0 = \mu_0(\kappa i), \quad i = \overline{0, N}; \quad (23)$$

$$y_0^j = f_0(\tau j), \quad j = \overline{1, M}; \quad (24)$$

$$y_{\bar{t},N} = \kappa y_{\bar{x},N} + h y_N - h f_l(\tau j), \quad j = \overline{1, M}. \quad (25)$$

Теорема 1 Пусть $0 \leq \psi'(d) \leq M$. Тогда решение разностной схемы (20) – (25) сходится к решению краевой задачи (1) – (6) со скоростью $O(\tau + \kappa)$.

Доказательство.

1) Докажем, что схема имеет первый порядок аппроксимации по τ, κ ($O(\tau + \kappa)$) на решении $\{u, a\}$ краевой задачи.

Совокупность двух функций $\{z, w\}$, где $z = y - u, w = d - a$ - погрешности, является решением следующей задачи:

$$z_{\bar{t}} - Dz_{\bar{x}\bar{x}} + \nu z_{\bar{x}} + \beta[z - \psi'(\hat{v})\hat{w}] = -\psi_1; \quad (26)$$

$$w_{\bar{t}} = \beta[\hat{z} - \psi'(\hat{v})\hat{w}] - \psi_2; \quad (27)$$

$$w^0 = z^0 = 0; \quad (28)$$

$$z_0 = 0; \quad (29)$$

$$-z_{\bar{t},N} = kz_{\bar{x},N} + hz_N - \psi_3. \quad (30)$$

Здесь введены следующие обозначения:

$$v = d + \theta(a - d), \theta \in [0, 1]; \quad (31)$$

$$\psi_1 = u_{\bar{t}} - Du_{\bar{x}\bar{x}} + \nu u_{\bar{x}} + \beta[u - \psi(\hat{a})]; \quad (32)$$

$$\psi_2 = a_{\bar{t}} - \beta[\hat{u} - \psi(\hat{a})]; \quad (33)$$

$$\psi_3 = -u_{\bar{t},N} - ku_{\bar{x},N} - hu_N. \quad (34)$$

Отсюда нетрудно видеть, что

$$\psi_1 = O(\tau + \kappa), \psi_2 = O(\tau), \psi_3 = O(\tau + \kappa). \quad (35)$$

2) Запишем уравнение (26) в виде, удобном для применения принципа максимума разностной схемы [1].

$$A_i z_{i-1}^j - C_i z_i^j + B_i z_{i+1}^j = -F_i,$$

$$A_i = \tau(D + \nu\kappa)/\kappa^2 > 0,$$

$$B_i = D\tau/\kappa^2 > 0,$$

$$C_i = A_i + B_i + 1 + \beta\tau > 0.$$

$$F_i = z_i^{j-1} + \beta\tau\psi'(v_i^{j-1})w_i^{j-1} - \tau\psi_{1i}^j.$$

Из принципа максимума разностной схемы известно, что

$$\|z^j\|_{(2\kappa)} \leq \|z^{j-1}\|_{(1\kappa)} + \beta\tau\mathcal{M}\|w^{j-1}\|_{(1\kappa)} + \tau\|\psi_1^j\|_{(2\kappa)}. \quad (36)$$

Из (27) имеем:

$$\frac{w_i^j - w_i^{j-1}}{\tau} = \beta \left[z_i^{j-1} - \psi'(v_i^{j-1})w_i^{j-1} \right] - \psi_2 \Rightarrow$$

$$\Rightarrow w_i^j = w_i^{j-1} \left(1 - \beta\tau\psi'(v_i^{j-1}) \right) + \beta\tau z_i^{j-1} - \tau\psi_2 \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \|w^j\|_{(1\kappa)} \leq \beta\tau \|z^{j-1}\|_{(1\kappa)} + (1 + \beta\tau\mathcal{M}) \|w^{j-1}\|_{(1\kappa)} + \tau \|\psi_2^j\|_{(1\kappa)}. \quad (37)$$

Условие (30) запишем в виде:

$$-\frac{z_N^j - z_N^{j-1}}{\tau} = k \frac{z_N^j - z_{N-1}^j}{\kappa} + h z_N^j - \psi_3 \Rightarrow$$

$$\Rightarrow z_N^j \left(\frac{1}{\tau} + \frac{k}{\kappa} + h \right) = \frac{1}{\tau} z_N^{j-1} + \frac{k}{\kappa} z_{N-1}^j - \psi_3. \quad (38)$$

Если $|z_N^j| \geq \|z^j\|_{(2\kappa)}$, то $|z_N^j| \geq |z_{N-1}^j|$ и из (38) имеем:

$$\left(\frac{1}{\tau} + \frac{k}{\kappa} + h \right) |z_N^j| \leq \frac{k}{\kappa} |z_{N-1}^j| + \frac{1}{\tau} |z_N^{j-1}| + |\psi_3| \leq$$

$$\leq \frac{k}{\kappa} |z_N^j| + \frac{1}{\tau} |z_N^{j-1}| + \max_{0 \leq k \leq j} |\psi_3^k| = \frac{k}{\kappa} |z_N^j| + \frac{1}{\tau} |z_N^{j-1}| + \|\psi_3\|_{(3\tau)} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \left(\frac{1}{\tau} + h \right) |z_N^j| \leq \frac{1}{\tau} |z_N^{j-1}| + \|\psi_3\|_{(3\tau)} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow |z_N^j| \leq \frac{1}{1 + \tau h} |z_N^{j-1}| + \frac{\tau}{1 + \tau h} \|\psi_3\|_{(3\tau)} \leq \left\{ \text{так как } \frac{1}{1 + \tau h} < 1 \right\} \leq$$

$$\leq |z_N^{j-1}| + \frac{\tau}{1 + \tau h} \|\psi_3\|_{(3\tau)} \leq |z_N^{j-2}| + \frac{2\tau}{1 + \tau h} \|\psi_3\|_{(3\tau)} \leq \dots \leq$$

$$\leq |z_N^0| + \frac{j\tau}{1 + \tau h} \|\psi_3\|_{(3\tau)} = \left\{ \text{так как из (28) } z_N^0 = 0 \right\} =$$

$$= \frac{j\tau}{1 + \tau h} \|\psi_3\|_{(3\tau)} \leq \{j \leq M, M\tau = T\} \leq \frac{T}{1 + \tau h} \|\psi_3\|_{(3\tau)}.$$

$$\text{Таким образом, } |z_N^j| \leq \frac{T}{1 + \tau h} \|\psi_3\|_{(3\tau)} \quad (39)$$

Введём следующие обозначения:

$$C_0 = \max\{1 + \beta\tau, 1 + 2\beta\tau\mathcal{M}\};$$

$$p^j = \max\{\|z^j\|_{(1\kappa)}, \|w^j\|_{(1\kappa)}\};$$

$$f^j = \max\{\|\psi_1^j\|_{(2\kappa)}, \|\psi_2^j\|_{(1\kappa)}\};$$

$$g = \frac{T}{1 + \tau h} \|\psi_3\|_{(3\tau)}.$$

Тогда из (36),(37),(39) имеют место следующие рассуждения:

$$\begin{aligned} p^j &\leq \max\{(1 + \tau C_0)p^{j-1} + \tau f^j, g\} \leq \\ &\leq \max\{(1 + \tau C_0) \max\{(1 + \tau C_0)p^{j-2} + \tau f^{j-1}, g\} + \tau f^j, g\} = \\ &= \max\{\max\{(1 + \tau C_0)^2 p^{j-2} + (1 + \tau C_0)\tau f^{j-1}, (1 + \tau C_0)g\} + \tau f^j, g\} = \\ &= \{ \text{внешний максимум исчезает, так как } (1 + C_0\tau)g > g \} = \\ &= \max\{(1 + \tau C_0)^2 p^{j-2} + (1 + \tau C_0)\tau f^{j-1}, (1 + \tau C_0)g\} + \tau f^j \leq \dots \leq \\ &\leq \max\{(1 + \tau C_0)^j p^0 + (1 + \tau C_0)^{j-1} \tau f^1, (1 + \tau C_0)^{j-1} g\} + \tau \sum_{i=2}^j (1 + C_0\tau)^{j-i} f^i \leq \\ &\leq (1 + \tau C_0)^j \left[\max\{p^0, g\} + \tau \sum_{i=1}^j f^i \right] \leq \\ &\leq \{ \text{т.к. } (1 + C_0\tau) \leq \exp\{C_0\tau\}, p^0 = 0 \} \leq e^{C_0\tau j} \left(\tau \sum_{i=1}^j f^i + g \right). \end{aligned}$$

Таким образом, доказана устойчивость разностной схемы по начальным данным и правой части.

Из аппроксимации и устойчивости следует сходимость разностной схемы со скоростью, равной порядку аппроксимации. То есть, имеем оценку:

$$\max\{\|y - u\|_{(1,\kappa,\tau)}, \|d - a\|_{(1,\kappa,\tau)}\} \leq C(\tau + \kappa).$$

Теорема 1 доказана.

Результаты расчётов прямой задачи. Прямая разностная задача решается стандартным методом правой прогонки [2]. Были проведены расчёты для следующих значений параметров и функций, входящих в уравнения:

$$\nu = 0.5, \beta = D = 0.1, k = h = 0.2, l = 2, T = 5.1, N = M = 20, \quad (40)$$

$$\mu_0(x) = 0.5 \left[1 - \sin \left(\frac{\pi x}{2l} \right) \right], \quad (41)$$

$$f_0(t) = 0.5 \left(1 + \sqrt[3]{t}\right), \quad f_1(t) = 0.5 \sqrt[3]{t}. \quad (42)$$

В качестве $\psi(\xi)$ использовалась функция, обратная изотерме Ленгмюра:

$$\psi(\xi) = \frac{\xi}{a - (a-1)\xi}. \quad (43)$$

На Рис. 1 приведено разностное решение прямой модельной задачи неравновесной динамики сорбции с внешнедиффузионной кинетикой, краевым условием первого рода и нестационарным краевым условием при значении параметра $a = 8$ функции (43).

ЗНДС с КУ 1 рода и нестационарн. КУ внешнедиффуз. кинетика, $u(x,t)$ ЗНДС с КУ 1 рода и нестационарн. КУ внешнедиффуз. кинетика, $a(x,t)$

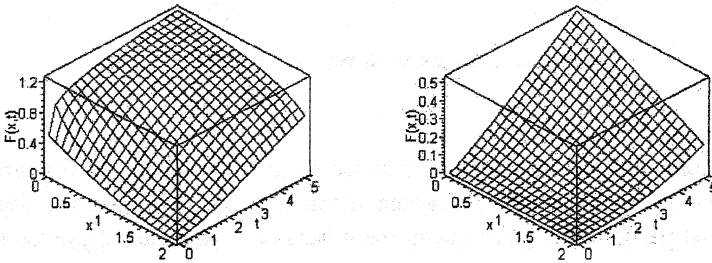


Рис. 1: Функции u_i^j, a_i^j решения задачи.

При расчётах прямой задачи при различных значениях параметров установлено наличие фронта концентрации,двигающегося вдоль оси x от точки $x = 0$ в точку $x = l$. Установлено, что концентрация внутри сорбента выравнивается по длине области сорбции с течением времени. Насыщение сорбента приводит к выравниванию концентрации примеси в потоке вещества внутри области сорбции.

Значения параметров D, ν влияют на скорость размытия концентрации внутри сорбционной области. При достаточно небольших значениях обоих параметров наблюдается движение видимого фронта концентрации вдоль оси x . При увеличении значений этих параметров

установлено достаточно быстрое насыщение сорбента и происходит выравнивание вдоль оси x концентрации вещества в потоке жидкости. При этом происходит видимое размытие фронта обеих концентраций.

Рис. 2 демонстрирует движение фронта концентрации.

ЗНДС с КУ 1 рода и нестационарная КУ внешнедиффузионная кинетика, $u(x,t)$

ЗНДС с КУ 1 рода и нестационарная КУ внешнедиффузионная кинетика, $a(x,t)$

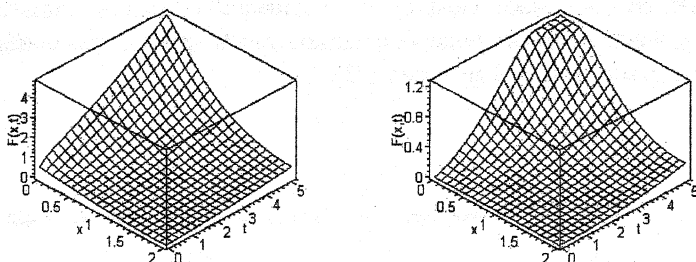


Рис. 2: Функции y_i^j, d_i^j решения задачи.

В правой части рисунка видно явное насыщение сорбента. При этом фронт концентрации $u(x,t)$ движется вдоль сорбционной области. Здесь приведены разностные решения прямой задачи с внешнедиффузионной кинетикой и нестационарным краевым условием для следующих значений параметров задачи:

$$\nu = D = 0.1, \beta = k = 0.2, h = 0.3, l = 2, T = 5.1, N = M = 20. \quad (44)$$

Функция $\psi(\xi)$ с параметром $a = 4$ удовлетворяет (43), граничные и начальные данные подчиняются следующим условиям: $\mu_0(x)$ удовлетворяет (41), на границах сорбционной области задаются функции:

$$f_0(t) = 0.5e^{\sqrt{t}}, \quad f_1(t) = 0.5\sqrt{t}. \quad (45)$$

Результаты численного решения обратной задачи.

При численном решении обратной задачи рассматривалось разбиение отрезка $[0, 1]$, на котором восстанавливается функция $\psi(\xi)$ при $a = 8$, на $\mathcal{N} = 9$ частей и на этой равномерной сетке решалась обратная задача. Рассматривались следующие значения параметров и функций

задачи: $\mu_0(x)$ удовлетворяет (41), $f_0(t), f_l(t)$ удовлетворяют (42), $\nu = D = \beta = 0.1, k = h = 0.2, N = M = 20, l = 1, T = 5.1$. Конечное множество элементов P_N имеет мощность 53281, оптимальным решением является функция $p_w^N(\xi)$, значения которой в сравнении с исходной функцией $\psi(\xi)$ приведены в Табл. 1.

Табл. 1: Значения исходной и восстановленной функции $\psi(\xi)$

ξ	$\psi(\xi)$	$p_w^N(\xi)$
0.000000	0.000000	0.000000
0.111111	0.015385	0.022222
0.222222	0.034483	0.044445
0.333333	0.058824	0.066667
0.444444	0.090909	0.088889
0.555556	0.135135	0.111111
0.666667	0.200000	0.222222
0.777778	0.304348	0.333333
0.888889	0.500000	0.555556
1.000000	1.000000	1.000000

Оптимальное решение, будучи подставленным в качестве изотермы в исходную задачу, даёт погрешность $\max |Ap_w^N(\xi) - \gamma(t)| = 0.001000$ на равномерной сетке области $\overline{Q_T}$ и равномерной сетке разбиения отрезка $[0,1]$ для расчётов обратной задачи $0 \leq i \leq 9$, что удовлетворяет заданной точности $\varepsilon = 0.01$. На этой же сетке $0 \leq i \leq 9$ сеточная норма разности исходной и рассчитанной функции $\psi(\xi)$ при этом равна $\max |\psi - p_w^N| = 0.055556$.

Графики сеточных функций $\gamma(\xi), Ap_w^N(\xi)$, соответствующих функциям $\psi(\xi), p_w^N(\xi)$, приведены в левой части Рис. 3. Из-за высокой точности совпадения этих двух функций различия между ними на графике практически не видны. Графики сеточных функций, приведённых в Табл. 1, изображены в правой части этого рисунка.

Были проведены расчёты обратной задачи для функции $\psi(\xi)$ (43), обратной к однопараметрической изотерме Лэнгмюра. При разных значениях параметра a функции $\psi(\xi)$ из (43) установлено следующее: чем менее выпукла вниз функция $\psi(\xi)$, тем меньше требуется посчитать

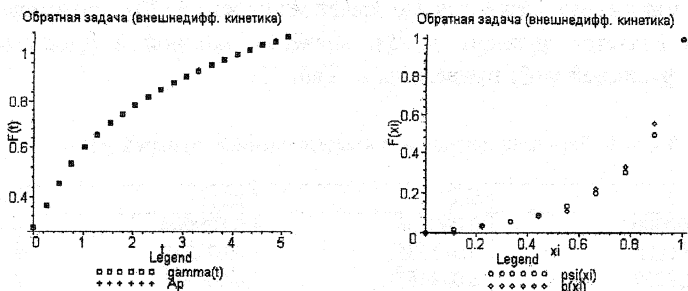


Рис. 3: Функции $\psi(\xi)$, $P_w^N(\xi)$, $\gamma(t)$, $Ap^N(\xi)$.

задач для решения обратной задачи и тем быстрее вычисляется решение обратной задачи.

Были проведены расчёты для значений параметров и функций задачи: $\mu_0(x)$ удовлетворяет (41), $f_0(t), f_i(t)$ удовлетворяют (45), $\nu = D = 0.1, \beta = 0.2, k = 0.2, h = 0.3, N = M = 20, l = 1, T = 5.1$. В качестве функции $\psi(\xi)$ использовалась функция (43) при $a = 4$.

Конечное множество элементов P_N в этом случае имеет мощность 19977, оптимальным решением является функция $P_w^N(\xi)$, значения которой в сравнении с исходной функцией $\psi(\xi)$ приведены в Табл. 2.

Табл. 2: Значения исходной и восстановленной функции $\psi(\xi)$

ξ	$\psi(\xi)$	$P_w^N(\xi)$
0.000000	0.000000	0.000000
0.111111	0.030303	0.044444
0.222222	0.066667	0.088889
0.333333	0.111111	0.133333
0.444444	0.166667	0.177778
0.555556	0.238095	0.222222
0.666667	0.333333	0.333333
0.777778	0.466667	0.444444
0.888889	0.666667	0.666667
1.000000	1.000000	1.000000

Оптимальное решение, будучи подставленным в качестве

функции $\psi(\xi)$ в исходную задачу, даёт погрешность $\max |Ap_w^N(\xi) - \gamma(t)| = 0.001000$, удовлетворяющую заданной точности $\varepsilon = 0.01$. Графики сеточных функций $\gamma(\xi)$, $Ap_w^N(\xi)$, соответствующих функциям $\psi(\xi)$, $p_w^N(\xi)$, приведены в левой части Рис. 4. Из-за высокой точности совпадения этих двух функций различия между ними на графике практически не видны. Сеточная норма разности исходной и рассчитанной функции $\psi(\xi)$ решения обратной задачи при этом равна $\max |\psi - p_w^N| = 0.022222$. Графики сеточных функций, приведённых в Табл. 2, изображены в правой части Рис. 4:

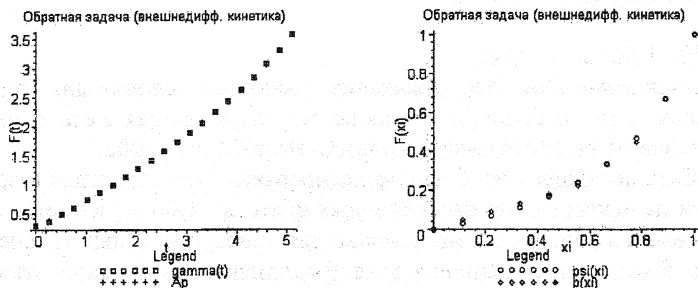


Рис. 4: Функции $\psi(\xi)$, $p_w^N(\xi)$, $\gamma(t)$, $Ap_w^N(\xi)$.

Литература

- [1] Самарский А.А. *Теория разностных схем*. М.: Наука, 1989.
- [2] Самарский А.А. Николаев Е.С. *Методы решения сеточных уравнений*. М.: Наука, 1978.