УДК 519.64

# ИТЕРАЦИОННЫЕ ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ ОПРЕДЕЛЕНИЯ КОЭФФИЦИЕНТА В МОДЕЛИ ДИНАМИКИ СОРБЦИИ<sup>1)</sup>

© 2024 г. А. М. Денисов<sup>1,\*</sup>, Чжу Дунцинь<sup>1,\*\*</sup>

<sup>1</sup> 119999 Москва, Ленинские горы, МГУ, Россия \*e-mail: den@cs.msu.ru \*\*e-mail: zhudq1002@163.com

Поступила в редакцию 02.04.2024 г. Переработанный вариант 21.05.2024 г. Принята к публикации 26.07.2024 г.

Рассматривается обратная коэффициентная задача для математической модели динамики сорбции. Обратная задача сводится к нелинейным операторным уравнениям относительно неизвестной функции. Эти уравнения используются для построения и обоснования сходимости итерационных методов решения обратной задачи. Приводятся примеры применения предложенных итерационных методов для численного решения обратной задачи. Библ. 29. Фиг. 2.

**Ключевые слова:** обратная задача, динамика сорбции, нелинейные операторные уравнения, итерационные метолы

DOI: 10.31857/S0044466924110135, EDN: KFUOBH

### 1. ВВЕДЕНИЕ

Исследование обратных задач для уравнений математической физики и разработка методов их решения является одним из активно развивающихся направлений современной прикладной математики. Многообразие обратных задач определяется различными типами уравнений, неизвестных функций, а также видом дополнительной информации, используемой для их поиска. К настоящему времени обратные задачи и методы их решения изучены в большом количестве работ (см., например, [1]—[8] и имеющуюся там библиографию). Среди разнообразных методов решения обратных задач можно выделить итерационные методы, успешно применяемые для решения как линейных, так и нелинейных обратных задач [9]—[14].

Математическое моделирование является одним из важных методов изучения процессов динамики сорбции и ионообмена [15]—[19]. Обратные задачи для математических моделей динамики сорбции возникают и при теоретическом анализе процессов переноса и поглощения вещества и при обработке и интерпретации результатов сорбционных экспериментов. Исследованию обратных задач динамики сорбции и разработке методов их решения посвящены публикации [20]—[27]. В работах [28], [29] были предложены итерационные методы решения обратных задач динамики сорбции с переменным кинетическим коэффициентом. В этой статье подобная обратная задача решается для другой математической модели динамики сорбции.

## 2. ИССЛЕДОВАНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ДИНАМИКИ СОРБЦИИ

Рассмотрим следующую математическую модель процесса динамики сорбции:

$$u_x(x,t) + a_t(x,t) = 0, \quad (x,t) \in Q_T,$$
 (1)

$$a_t(x,t) = \gamma(t)(\varphi(u(x,t)) - a(x,t)), \quad (x,t) \in Q_T,$$
 (2)

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

$$a(x,0) = 0, \quad 0 \le x \le l,$$
 (4)

<sup>1)</sup> Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки РФ в рамках реализации программы Московского центра фундаментальной и прикладной математики по соглашению № 075-15-2022-284.

где u(x,t) — концентрация вещества в порах сорбента, a(x,t) — концентрация вещества в сорбенте,  $\mu(t)$  — входная концентрация,  $\gamma(t)$  — кинетический коэффициент,  $\varphi(s)$  — функция, характеризующая поглощающие свойства сорбента,  $Q_{\tau} = \{(x,t): 0 \le x \le l, 0 \le t \le \tau\}$ .

Будем предполагать, что функции  $\mu(t)$ ,  $\gamma(t)$ ,  $\varphi(s)$  удовлетворяют следующим условиям:

$$\mu, \gamma \in C[0, T], \quad \mu(t) > 0, \quad \gamma(t) > 0, \quad t \in [0, T];$$
(5)

$$\varphi(s) \in C^1(R), \quad \varphi(0) = 0, \quad 0 < \varphi'(s) \le \varphi_1, \quad s \in R,$$
(6)

где  $\phi_1$  — положительная постоянная.

Дадим определение решения задачи (1)-(4).

**Определение 1.** *Решением задачи* (1)—(4) будем называть пару функций u(x,t), a(x,t), таких, что u, a,  $u_x$ ,  $a_t \in Q_T$  и u(x,t), a(x,t) удовлетворяют (1)—(4).

Справедлива следующая лемма о существовании единственного решения задачи (1)—(4) и его свойствах.

**Лемма 1.** Пусть функции  $\gamma(t)$ ,  $\mu(t)$  и  $\varphi(s)$  удовлетворяют условиям (5), (6). Тогда существует единственная пара функций u(x,t), a(x,t), являющихся решением задачи (1)—(4). Кроме того,

$$u(x,t) > 0, \quad (x,t) \in Q_T, \quad a(x,t) > 0, \quad 0 \le x \le l, \quad 0 < t \le T.$$
 (7)

**Доказательство.** Предположим, что функции u(x,t), a(x,t) являются решением задачи (1)—(4). Интегрируя уравнение (2) с начальным условием (4), получим

$$a(x,t) = \int_0^t e^{-\int_{\tau}^t \gamma(\theta)d\theta} \gamma(\tau) \varphi(u(x,\tau)) d\tau, \quad (x,t) \in Q_T.$$
 (8)

Из уравнений (1), (2) и (7) следует, что

$$u_x(x,t) = -\gamma(t)\varphi(u(x,t)) + \gamma(t) \int_0^t e^{-\int_{\tau}^t \gamma(\theta)d\theta} \gamma(\tau)\varphi(u(x,\tau))d\tau, \quad (x,t) \in Q_T.$$
 (9)

Интегрируя это уравнение с условием (3), получим интегральное уравнение для функции u(x,t):

$$u(x,t) = \mu(t) - \gamma(t) \int_0^x \varphi(u(s,t))ds + \gamma(t) \int_0^x \int_0^t e^{-\int_{\tau}^t \gamma(\theta)d\theta} \gamma(\tau) \varphi(u(s,\tau))d\tau ds, \quad (x,t) \in Q_T.$$
 (10)

Следовательно, если функции u(x,t), a(x,t) являются решением задачи (1)—(4), то они удовлетворяют системе интегральных уравнений (8), (10).

Справедливо и обратное. Пусть функции  $u, a \in C(Q_T)$  и удовлетворяют уравнениям (8), (10). Очевидно, что тогда  $u_x, a_t \in C(Q_T)$  и u(x,t), a(x,t) являются решением задачи (1)—(4). Следовательно, для доказательства существования и единственности решения этой задачи достаточно доказать существование и единственность непрерывных решений u(x,t), a(x,t) системы интегральных уравнений (8), (10). Так как из уравнения (8) следует, что функция a(x,t) однозначно определяется функцией u(x,t), то достаточно доказать, что непрерывное решение u(x,t) уравнения (10) существует и единственно. Для доказательства используем метод последовательных приближений.

Рассмотрим на  $Q_T$  последовательность функций  $u_n(x,t), n=0,1,2,...$ , таких, что  $u_0(x,t)=0$ ,

$$u_n(x,t) = \mu(t) - \gamma(t) \int_0^x \varphi(u_{n-1}(s,t)) ds + \gamma(t) \int_0^x \int_0^t e^{-\int_{\tau}^t \gamma(\theta) d\theta} \gamma(\tau) \varphi(u_{n-1}(s,\tau)) d\tau ds. \tag{11}$$

Покажем, используя метод математической индукции, что справедлива оценка для всех  $n\geqslant 1$ 

$$|u_n(x,t) - u_{n-1}(x,t)| \le \|\mu\|_{C[0,T]} (2\varphi_1 \|\gamma\|_{C[0,T]})^{n-1} \frac{x^{n-1}}{(n-1)!}, \quad (x,t) \in Q_T.$$
(12)

При n=1 оценка (12) справедлива. Предположим, что она верна при n=m и докажем ее для n=m+1. Так как

$$|u_{m+1}(x,t) - u_m(x,t)| \leqslant \gamma(t) \int_0^x |\varphi(u_m(s,t)) - \varphi(u_{m-1}(s,t))| ds +$$

$$+ \gamma(t) \int_0^x \int_0^t e^{-\int_{\tau}^t \gamma(\theta) d\theta} \gamma(\tau) |\varphi(u_m(s,\tau)) - \varphi(u_{m-1}(s,\tau))| d\tau ds \leqslant$$

$$\begin{split} \leqslant \|\gamma\|_{C[0,T]} \varphi_1 \int_0^x |u_m(s,t) - u_{m-1}(s,t)| ds + \\ + \|\gamma\|_{C[0,T]} \varphi_1 \int_0^x \int_0^t e^{-\int_{\tau}^t \gamma(\theta) d\theta} \gamma(\tau) |u_m(s,\tau) - u_{m-1}(s,\tau)| d\tau ds \leqslant \\ \leqslant \|\gamma\|_{C[0,T]} \varphi_1 \|\mu\|_{C[0,T]} (2\varphi_1 \|\gamma\|_{C[0,T]})^{m-1} \int_0^x \frac{s^{m-1}}{(m-1)!} ds \left(1 + \int_0^t \gamma(\tau) e^{-\int_{\tau}^t \gamma(\theta) d\theta} d\tau\right) \leqslant \\ \leqslant \|\mu\|_{C[0,T]} \left(2\varphi_1 \|\gamma\|_{C[0,T]}\right)^m \frac{x^m}{m!}, \quad (x,t) \in Q_T, \end{split}$$

то оценка (12) справедлива при любом  $n \geqslant 1$ .

Из оценки (12) следует, что при  $n \to \infty$  последовательность непрерывных функций  $u_n(x,t)$  равномерно на  $Q_T$  сходится к непрерывной в  $Q_T$  функции u(x,t). Переходя в формуле (11) к пределу при  $n \to \infty$  получим, что u(x,t) является решением уравнения (10). Таким образом существование решения задачи (1)—(4) доказано.

Докажем единственность. Предположим, что существует две пары функций  $u_i(x,t)$ ,  $a_i(x,t)$ , i=1,2, являющихся решением задачи (1)—(4). Следовательно, функции  $u_i(x,t)$  удовлетворяют интегральному уравнению (10). Тогда для  $v(x,t) = |u_1(x,t) - u_2(x,t)|$  справедливо неравенство

$$v(x,t)\leqslant \varphi_1\gamma(t)\int_0^x v(s,t)ds + \varphi_1\gamma(t)\int_0^x \int_0^t e^{-\int_{\tau}^t \gamma(\theta)d\theta}\gamma(\tau)v(s,\tau)d\tau ds, \quad (x,t)\in Q_T.$$

Из этого неравенства и леммы Гронуолла—Беллмана следует, что v(x,t)=0 в  $Q_T$ . Тогда  $u_1(x,t)=u_2(x,t)$ ,  $a_1(x,t)=a_2(x,t)$  в  $Q_T$  и единственность решения задачи (1)—(4) доказана.

Докажем неравенства (7). Из уравнения (2) и условий (3)—(6) следует, что  $u(x,0)>\mu(0)\exp(-\gamma(0)\phi_1x)>0, \ x\in[0,l].$  Покажем, что  $u(x,t)\geqslant 0, \ (x,t)\in Q_T.$  Предположим противное. Тогда существует точка  $(x_1,t_1), \ 0< x_1\leq l, \ 0< t_1\leq T,$  такая, что  $u(x_1,t_1)=\min_{Q_T}u(x,t)<0.$  Тогда  $u_x(x_1,t_1)\leq 0.$  Но положив в уравнении (9)  $x=x_1,t=t_1,$  имеем

$$u_x(x_1,t_1) = -\gamma(t_1)\varphi(u(x_1,t_1)) + \gamma(t_1)\int\limits_0^{t_1}\exp\left(-\int\limits_{\tau}^{t_1}\gamma(\theta)d\theta\right)\gamma(\tau)\varphi(u(x_1,\tau))d\tau \geqslant$$

$$\geqslant -\gamma(t_1)\varphi(u(x_1,t_1)) + \gamma(t_1)\int_0^{t_1} \exp\left(-\int_{\tau}^{t_1} \gamma(\theta)d\theta\right)\gamma(\tau)\varphi(u(x_1,t_1))d\tau > 0.$$

Полученное противоречие доказывает неравенство  $u(x,t)\geqslant 0, (x,t)\in Q_T$ . Из этого неравенства, положительности функции u(x,0) и уравнения (8) следует положительность a(x,t) при  $0\leq x\leq l, \quad 0< t\leq T$ . Таким образом, осталось показать строгую положительность u(x,t) в  $Q_T$ . Если предположить существование точки  $(x_0,t_0)$  такой, что  $u(x_0,t_0)=0$ , то из условия минимума имеем  $u_x(x_0,t_0)\leq 0$ , а из уравнения (2)  $u_x(x_0,t_0)=-a_t(x_0,t_0)=\gamma(t_0)a(x_0,t_0)>0$ . Полученное противоречие доказывает строгую положительность u(x,t) в  $Q_T$  и лемма доказана.

#### 3. ОБРАТНАЯ ЗАДАЧА И ОПЕРАТОРНЫЕ УРАВНЕНИЯ

Перейдем к постановке обратной задачи. Далее, чтобы подчеркнуть зависимость решения задачи (1)—(4) от функции  $\gamma(t)$  будем обозначать его  $u(x,t;\gamma)$ ,  $a(x,t;\gamma)$ .

Сформулируем обратную **Задачу**. Пусть функции  $\varphi(s)$  и  $\mu(t)$  заданы, а  $\gamma(t)$  неизвестна. Требуется определить  $\gamma(t)$  по дополнительной информации о решении задачи (1)—(4)

$$u(l,t;\gamma) = g(t), \quad 0 \le t \le T, \tag{13}$$

где g(t) — заданная положительная непрерывная функция.

Пусть  $t_0 \in (0, T]$ . Дадим определение решения обратной задачи на отрезке  $[0, t_0]$ .

**Определение 2.** Функция  $\gamma(t)$  называется решением обратной задачи на отрезке  $[0,t_0]$ , если  $\gamma \in C[0,t_0]$ ,  $\gamma(t)>0$ ,  $t\in [0,t_0]$ ,  $u(x,t;\gamma)$ ,  $u(x,t;\gamma)$ , удовлетворяют (1)—(4), (13) для  $(x,t)\in Q_{t_0}$ .

Покажем, что решение обратной задачи эквивалентно решению нелинейного операторного уравнения.

Введем функцию

$$\Phi(s) = \int_{b}^{s} \frac{d\xi}{\varphi(\xi)},$$

где b — заданная положительная постоянная, такая, что  $b < \min\{\min_{[0,T]} \mu(t), \min_{[0,T]} g(t)\}.$ 

Пусть функция  $\gamma(t)$  является решением обратной задачи на отрезке  $[0,t_0]$ . Тогда функция  $u(x,t;\gamma)$  удовлетворяет уравнению (9). Поделив это уравнение на  $\varphi(u(x,t;\gamma))$ , проинтегрировав от 0 до x, использовав введенную функцию  $\Phi(s)$  и условие (3), получим

$$\Phi(u(x,t;\gamma)) - \Phi(\mu(t)) = -\gamma(t)x + \int_0^x \frac{\gamma(t)}{\varphi(u(s,t;\gamma))} \int_0^t e^{-\int_{\tau}^t \gamma(\theta)d\theta} \gamma(\tau) \varphi(u(s,\tau;\gamma)) d\tau ds, \quad (x,t) \in Q_{t_0}.$$
 (14)

Положив в этом уравнении x=l и использовав условие (13), имеем

$$\Phi(g(t)) - \Phi(\mu(t)) = -\gamma(t)l + \int_0^l \frac{\gamma(t)}{\varphi(u(s,t;\gamma))} \int_0^t e^{-\int_{\tau}^t \gamma(\theta)d\theta} \gamma(\tau) \varphi(u(s,\tau;\gamma)) d\tau ds, \quad 0 \le t \le t_0.$$
 (15)

Таким образом, мы показали, что, если функция  $\gamma(t)$  является решением обратной задачи на отрезке  $[0, t_0]$ , то она удовлетворяет уравнению (15).

Справедливо и обратное. Пусть функция  $\bar{\gamma}(t)$  является непрерывным, положительным решением уравнения (15) на отрезке  $[0,t_0]$ . Тогда функция  $u(x,t;\bar{\gamma})$  удовлетворяет уравнению (14). Полагая в уравнении (14) x=l и учитывая уравнение (15), имеем  $\Phi(u(l,t;\bar{\gamma}))=\Phi(g(t)),\quad 0\leq t\leq t_0$ . Следовательно,  $u(x,t;\bar{\gamma})$  удовлетворяет условию (13) для  $t\in[0,t_0]$ , а значит,  $\bar{\gamma}(t)$  является решение обратной задачи на отрезке  $[0,t_0]$ .

Уравнение (15) можно записать в виде следующего операторного уравнения:

$$\gamma(t) = (A_1 \gamma)(t), \quad 0 \le t \le t_0, \tag{16}$$

где оператор  $(A_1\gamma)(t)$  определяется в виде

$$(A_1\gamma)(t) = (\Phi(\mu(t)) - \Phi(g(t))) \times \left[ l - \int_0^l \frac{1}{\varphi(u(s,t;\gamma))} \int_0^t e^{-\int_{\tau}^t \gamma(\theta)d\theta} \gamma(\tau) \varphi(u(s,\tau;\gamma)) d\tau ds \right]^{-1}.$$
(17)

Можно записать и другой вариант уравнения (15):

$$\gamma(t) = (A_2 \gamma)(t), \quad 0 < t < t_0, \tag{18}$$

где оператор  $(A_2\gamma)(t)$  определяется в виде

$$(A_2\gamma)(t) = \frac{\Phi(\mu(t)) - \Phi(g(t))}{l} + l^{-1} \int_0^l \frac{\gamma(t)}{\varphi(u(s,t;\gamma))} \int_0^t e^{-\int_{\tau}^t \gamma(\theta)d\theta} \gamma(\tau) \varphi(u(s,\tau;\gamma)) d\tau ds.$$
(19)

Очевидно, что положительное непрерывное решение уравнения (16) или (18) является решением обратной задачи.

#### 4. ИТЕРАЦИОННЫЕ МЕТОДЫ И ИХ СХОДИМОСТЬ

Операторные уравнения (16) или (18) позволяют определить итерационные методы для их решения.

Рассмотрим вопрос о множестве на котором мы будем доказывать сходимость этих методов. Пусть функция  $\gamma(t)$  является решением обратной задачи на отрезке  $[0,t_0]$ . Положив в уравнении (15) t=0, имеем  $\gamma(0)=\gamma_0=(\Phi(\mu(0))-\Phi(g(0)))l^{-1}$ . Таким образом, значение искомого решения обратной задачи в нуле известно, а необходимым условием разрешимости обратной задачи является неравенство  $\mu(0)>g(0)$ .

Рассмотрим множество

$$\Gamma_0 = \{ \gamma(t) : \gamma \in C[0, t_0], \gamma_0/2 < \gamma(t) < 3\gamma_0/2, t \in [0, t_0] \},$$

где  $t_0 \in (0, T]$ .

Определим итерационный процесс для решения операторного уравнения (16). Рассмотрим следующую последовательность функции  $\gamma_0(t) = \gamma_0$ :

$$\gamma_{n+1}(t) = (A_1 \gamma_n)(t), \quad n = 0, 1, 2..., \quad 0 \le t \le t_0.$$
(20)

Установим сходимость этого итерационного процесса. Докажем предварительно следующую лемму.

**Лемма 2.** Пусть функции  $\mu(t)$  и  $\varphi(s)$  удовлетворяют следующим условиям:  $\mu \in C[0,T]$ ;  $\mu(t)>0$ ,  $t\in [0,T]$ ;  $\varphi\in C^1(R)$ ,  $\varphi(0)=0$ ,  $0<\varphi'(s)\leq \varphi_1$ ,  $s\in R$ ,  $\varphi_1-{\rm const.}$  Тогда для любых  $\gamma_1,\gamma_2\in \Gamma_0$  справедлива оценка

$$\max_{Q_{t_0}} |u(x, t, \gamma_1) - u(x, t, \gamma_2)| \le c_1 ||\gamma_1 - \gamma_2||_{C[0, t_0]}.$$

Здесь и далее через  $c_i$  обозначаются постоянные, не зависящие от  $t_0 \in (0,T]$  и  $\gamma \in \Gamma_0$ .

**Доказательство.** Докажем равномерную ограниченность  $u(x,t;\gamma)$  на множестве  $\Gamma_0$ . Из уравнения (10) следует неравенство

$$u(x,t;\gamma) \le \mu(t) + \gamma(t) \int_0^x \int_0^t e^{-\int_{\tau}^t \gamma(\theta)d\theta} \gamma(\tau) \varphi(u(s,\tau;\gamma)) d\tau ds, \quad (x,t) \in Q_{t_0}.$$
 (21)

Введем функцию  $U(t) = \max_{[0,l]} |u(x,t;\gamma)|$ . Учитывая неравенство (21), имеем

$$U(t) \le \|\mu\|_{C[0,T]} + \frac{9}{4}\gamma_0^2 \varphi_1 l \int_0^t U(\tau) d\tau, \quad 0 \le t \le t_0.$$

Следовательно,

$$u(x,t;\gamma) \le U(t) \le c_2, \quad (x,t) \in Q_{t_0}, \quad \forall \gamma \in \Gamma_0,$$
 (22)

где  $c_2 = \|\mu\|_{C[0,T]} \exp\left(\frac{9}{4}\gamma_0^2 \varphi_1 lT\right).$ 

Используя неравенство (22) и уравнение (8), получим оценку для функции  $a(x,t;\gamma)$ :

$$a(x,t;\gamma) \le \varphi_1 c_2, \quad (x,t) \in Q_{t_0}, \quad \forall \gamma \in \Gamma_0.$$
 (23)

Пусть  $\gamma_1, \gamma_2 \in \Gamma_0$ . Введем функции

$$v(x,t) = u(x,t;\gamma_1) - u(x,t;\gamma_2), \quad w(x,t) = a(x,t;\gamma_1) - a(x,t;\gamma_2), \quad \hat{\gamma}(t) = \gamma_1(t) - \gamma_2(t).$$

Так как функции  $u(x,t;\gamma_i)$ ,  $a(x,t;\gamma_i)$ , i=1,2, являются решениями задачи (1)—(4) с функциями  $\gamma_i(t)$  соответственно, то v(x,t), w(x,t),  $\hat{\gamma}(t)$  удовлетворяют следующим уравнениям и условиям:

$$v_x + w_t = 0, \quad (x, t) \in Q_{t_0},$$
 (24)

$$w_t = \hat{\gamma}(t)p(x,t) + q(x,t)v - \gamma_2(t)w, \quad (x,t) \in Q_{t_0},$$
 (25)

$$v(0,t) = 0, \quad 0 \le t \le t_0, \tag{26}$$

$$w(x,0) = 0, \quad 0 \le x \le l, \tag{27}$$

где

$$p(x,t) = \varphi(u_1(x,t;\gamma)) - a_1(x,t;\gamma),$$

$$q(x,t) = \gamma_2(t) \int_0^1 \varphi'(u_2(x,t) + \theta(u_1(x,t) - u_2(x,t))) d\theta.$$

Интегрируя уравнение (25) с условием (27), имеем

$$w(x,t) = \int_{0}^{t} e^{-\int_{\tau}^{t} \gamma_{2}(\theta)d\theta} (\hat{\gamma}(\tau)p(x,\tau) + q(x,\tau)v(x,\tau))d\tau, \quad (x,t) \in Q_{t_{0}}.$$

$$(28)$$

Из уравнений (24), (25), (28) и условия (26), следует, что

$$v(x,t) = \int\limits_0^x e^{-\int\limits_s^x q(\xi,t)d\xi} \gamma_2(t) \int\limits_0^t e^{-\int\limits_\tau^t \gamma_2(\theta)d\theta} (\hat{\gamma}(\tau)p(s,\tau) + q(s,\tau)v(s,\tau))d\tau ds - \int\limits_0^x e^{-\int\limits_s^x q(\xi,t)d\xi} \gamma_2(t) \int\limits_0^t e^{-\int\limits_\tau^t \gamma_2(\theta)d\theta} (\hat{\gamma}(\tau)p(s,\tau) + q(s,\tau)v(s,\tau))d\tau ds - \int\limits_0^x e^{-\int\limits_s^x q(\xi,t)d\xi} \gamma_2(t) \int\limits_0^t e^{-\int\limits_\tau^t \gamma_2(\theta)d\theta} (\hat{\gamma}(\tau)p(s,\tau) + q(s,\tau)v(s,\tau))d\tau ds - \int\limits_0^x e^{-\int\limits_s^x q(\xi,t)d\xi} \gamma_2(t) \int\limits_0^t e^{-\int\limits_\tau^t \gamma_2(\theta)d\theta} (\hat{\gamma}(\tau)p(s,\tau) + q(s,\tau)v(s,\tau))d\tau ds - \int\limits_0^x e^{-\int\limits_s^x q(\xi,t)d\xi} \gamma_2(t) \int\limits_0^t e^{-\int\limits_\tau^t \gamma_2(\theta)d\theta} (\hat{\gamma}(\tau)p(s,\tau) + q(s,\tau)v(s,\tau))d\tau ds - \int\limits_0^x e^{-\int\limits_s^t \gamma_2(\theta)d\theta} (\hat{\gamma}(\tau)p(s,\tau) + q(s,\tau)v(s,\tau) + q(s,\tau)v(s$$

$$-\int_{0}^{x} e^{-\int_{s}^{x} q(\xi,t)d\xi} \hat{\gamma}(t)p(s,t)ds, \quad (x,t) \in Q_{t_0}.$$
 (29)

Учитывая оценки (22), (23), имеем

$$|v(x,t)| \le l\varphi_1 c_2 (3\gamma_0 T + 2) \|\gamma_1 - \gamma_2\|_{C[0,t_0]} + \frac{9}{4} \gamma_0^2 \varphi_1 \int_0^x \int_0^t |v(s,\tau)| d\tau ds, \quad (x,t) \in Q_{t_0}.$$

Следовательно,

$$\max_{Q_{t_0}} |u(x, t, \gamma_1) - u(x, t, \gamma_2)| \le c_1 \|\gamma_1 - \gamma_2\|_{C[0, t_0]},$$

где  $c_1 = \varphi_1 c_2 l(3\gamma_0 T + 2) e^{\frac{9}{4}\gamma_0^2 lT}$ , и лемма доказана.

**Теорема 1.** Пусть функция  $\varphi(s)$  удовлетворяет условиям (6), а  $\mu, g \in C[0,T]$ ,  $\mu(t) > 0, g(t) > 0, t \in [0,T]$ ,  $\mu(0) > g(0)$ . Тогда существует  $t_0 \in (0,T]$  такое, что последовательность функций  $\gamma_n(t)$ , определенных формулой (20), равномерно сходится на отрезке  $[0,t_0]$  к решению обратной задачи.

**Доказательство.** Из принципа сжимающих отображений следует, что для доказательства теоремы достаточно показать, что существует  $t_0 \in (0,T]$ , при котором оператор  $A_1$  отображает множество  $\Gamma_0$  в себя и является сжимающим на этом множестве.

Найдем условие, при котором  $A_1\Gamma_0\subseteq\Gamma_0$ . Обозначим через  $\mu_m$  минимум функции  $\mu(t)$  на отрезке [0,T]. Из уравнений (1), (2), условия (3) и неравенств (7) следует, что

$$u(x,t;\gamma) \geqslant c_3 = \mu_m \exp(-3\gamma_0 \varphi_1 l/2) \quad \forall \gamma \in \Gamma_0, \quad \forall (x,t) \in Q_T.$$
 (30)

Используя неравенства (22), (30), имеем

$$\int_{0}^{l} \int_{0}^{t} \exp\left(-\int_{\tau}^{t} \gamma(\theta) d\theta\right) \gamma(\tau) \frac{\varphi(u(s,\tau;\gamma))}{\varphi(u(s,t;\gamma))} d\tau ds \le c_{4}t_{0} \quad \forall \gamma \in \Gamma_{0}, \quad \forall (x,t) \in Q_{t_{0}},$$
(31)

где  $c_4 = l3\gamma_0(2\varphi(c_3))^{-1}\varphi_1c_2$ .

Обозначим через  $\omega_{\mu}(\delta)$  и  $\omega_g(\delta)$  модули непрерывности функций  $\Phi(\mu(t))$  и  $\Phi(g(t))$  на отрезке [0,T]. Из определения оператора  $A_1$  и неравенства (31) следует, что

$$\begin{split} |(A_1\gamma)(t) - \gamma_0| &= |(A_1\gamma)(t) - (A_1\gamma)(0)| \leq \frac{|\Phi(\mu(t)) - \Phi(\mu(0)) - (\Phi(g(t)) - \Phi(g(0)))|}{l - c_4 t_0} + \\ &+ \frac{\Phi(\mu(0)) - \Phi(g(0))}{l(l - c_4 t_0)} \int\limits_0^l \int\limits_0^t \exp\left(-\int\limits_\tau^t \gamma(\theta) d\theta\right) \gamma(\tau) \frac{\varphi(u(s, \tau; \gamma))}{\varphi(u(s, t; \gamma))} d\tau ds \leq \\ &\leq \frac{\omega_\mu(t_0) + \omega_g(t_0) + (\Phi(\mu(0)) - \Phi(g(0)))l^{-1}c_4 t_0}{l - c_4 t_0} \quad \forall \gamma \in \Gamma_0, \quad 0 \leq t \leq t_0. \end{split}$$

Таким образом, если некоторого  $t_0 \in (0,T]$  выполнено неравенство

$$(\omega_{\mu}(t_0) + \omega_q(t_0) + (\Phi(\mu(0)) - \Phi(g(0)))l^{-1}c_4t_0)(l - c_4t_0)^{-1} \le \gamma_0/2, \tag{32}$$

то оператор  $A_1$  отображает множество  $\Gamma_0$  в себя.

Найдем условие, при выполнении которого оператор  $A_1$  будет сжимающим на множестве  $\Gamma_0$ . Обозначим через  $\Phi_M$  максимум модуля функции  $\Phi(\mu(t)) - \Phi(g(t))$  на отрезке [0,T]. Из неравенства (31) следует, что для любых  $\gamma_1, \gamma_2 \in \Gamma_0$  и  $t \in [0,t_0]$  выполнено неравенство

$$\begin{split} |(A_1\gamma_1)(t)-A_1\gamma_2)(t)| &\leq \Phi_M(l-c_4t_0)^{-2}\times \\ &\times \int\limits_0^l \int\limits_0^t \left|\exp\left(-\int\limits_\tau^t \gamma_1(\theta)d\theta\right)\gamma_1(\tau)\frac{\phi(u(s,\tau;\gamma_1))}{\phi(u(s,t;\gamma_1))} - \exp\left(-\int\limits_\tau^t \gamma_2(\theta)d\theta\right)\gamma_2(\tau)\frac{\phi(u(s,\tau;\gamma_2))}{\phi(u(s,t;\gamma_2))}\right| d\tau ds. \end{split}$$

Используя лемму 2 и неравенство (30), имеем

$$||A_1\gamma_1 - A_1\gamma_2||_{C[0,T]} \le \Phi_M(l - c_4t_0)^{-2}l\left[(\varphi(c_3))^{-2}c_13\gamma_0\varphi_1^2c_2/2 + t_0(\varphi(c_3))^{-1}3\gamma_0\varphi_1c_2/2 + t_0(\varphi(c_3))^{-1}\varphi_1^2(c_3)\right] + t_0(\varphi(c_3))^{-2}l\left[(\varphi(c_3))^{-2}c_1\beta_1\varphi_1^2(c_3)^{-2}\right] + t_0(\varphi(c_3))^{-2}l\left[(\varphi(c_3))^{-2}c_1\beta_1\varphi$$

$$+(\varphi(c_3))^{-1}\varphi_1c_2 + (\varphi(c_3))^{-1}3\gamma_0\varphi_1c_1/2 \mid t_0 \mid \gamma_1 - \gamma_2 \mid_{C[0,T]} \forall \gamma_1, \gamma_2 \in \Gamma_0.$$

Следовательно, если  $t_0$  таково, что

$$\Phi_M(l - c_4 t_0)^{-2} l \left[ (\varphi(c_3))^{-2} c_1 3 \gamma_0 \varphi_1^2 c_2 / 2 + t_0 (\varphi(c_3))^{-1} 3 \gamma_0 \varphi_1 c_2 / 2 + (\varphi(c_3))^{-1} \varphi_1 c_2 + (\varphi(c_3))^{-1} 3 \gamma_0 \varphi_1 c_1 / 2 \right] t_0 < 1,$$
(33)

то оператор  $A_1$  является сжимающим на множестве  $\Gamma_0$ .

Очевидно, что существует  $t_0 \in (0,T]$ , для которого неравенства (32) и (33) выполнены. При этом  $t_0$  оператор  $A_1$  отображает множество  $\Gamma_0$  в себя и является сжимающим на этом множестве. Теорема доказана.

Определим итерационный процесс для решения операторного уравнения (18). Рассмотрим последовательность функций  $\gamma_0(t) = \gamma_0$ ,

$$\gamma_{n+1} = (A_2 \gamma_n)(t), \quad n = 0, 1, 2, ..., \quad 0 \le t \le t_0.$$
(34)

Сходимость этого процесса обосновывается следующей теоремой.

**Теорема 2.** Пусть функция  $\varphi(s)$  удовлетворяет условиям (6), а  $\mu, g \in C[0,T]$ ,  $\mu(t) > 0, g(t) > 0, t \in [0,T]$ ,  $\mu(0) > g(0)$ . Тогда существует  $t_0 \in (0,T]$  такое, что последовательность функций  $\gamma_n(t)$ , определенных формулой (34) равномерно сходится на отрезке  $[0,t_0]$  к решению обратной задачи.

Доказательство этой теоремы аналогично доказательству теоремы 1.

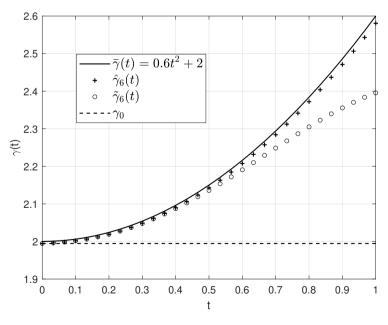
#### 5. ПРИМЕРЫ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ

Схема расчетов была такова. Задавались функции  $\varphi(s)$ ,  $\mu(t)$ ,  $\bar{\gamma}(t)$ , числа l и T. С ними итерационным методом (11) решалось уравнение (10), находилась функция  $u(x,t;\bar{\gamma})$  и определялась  $g(t)=u(l,t;\bar{\gamma})$ . Затем с функцией g(t) решалась обратная задача и результаты сравнивались с  $\bar{\gamma}(t)$ . Приведем численные примеры. Приближенные значения решений обратной задачи  $\hat{\gamma}(t)$  и  $\tilde{\gamma}(t)$  определялись в результате применения двух итерационных методов

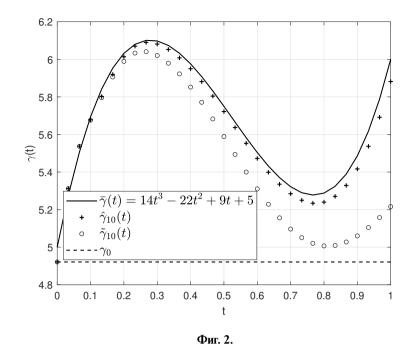
$$\gamma_{n+1}(t) = (A_1 \gamma_n)(t), \quad \gamma_0(t) = \gamma_0; \qquad \gamma_{n+1}(t) = (A_2 \gamma_n)(t), \quad \gamma_0(t) = \gamma_0, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Расчеты проводились при  $l=1, T=1, \mu(t)=t+0.2, \phi(s)=s(1+s)^{-1}.$  Число итераций N определялось из условия  $\|\gamma_N(t)-\gamma_{N-1}(t)\|_{C[0,T]}\leq \varepsilon, \varepsilon=0.001.$ 

На фиг. 1 изображены функция  $\bar{\gamma}(t)=0.6t^2+2$  и шестые итерации первого  $\hat{\gamma}_6(t)$  и второго  $\tilde{\gamma}_6(t)$  методов. Условие останова итераций в первом методе выполнено при N=9, а во втором при N=25. На фиг. 1 функции  $\hat{\gamma}_9(t)$  и  $\tilde{\gamma}_{25}(t)$  совпадают с  $\bar{\gamma}(t)$ .



Фиг. 1.



На фиг. 2 изображены функция  $\bar{\gamma}(t)=14t^3-22t^2+9t+5$  и десятые итерации первого  $\hat{\gamma}_{10}(t)$  и второго  $\tilde{\gamma}_{10}(t)$  методов. Условие останова итераций в первом методе выполнено при N=18, а во втором при N=81. На фиг. 2 функции  $\hat{\gamma}_{18}(t)$  и  $\tilde{\gamma}_{81}(t)$  совпадают с  $\bar{\gamma}(t)$ .

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. Тихонов А.Н., Арсенин В.Я. Методы решения некорректных задач. М.: Наука, 1987.
- 2. *Лаврентьев М.М., Романов В.Г., Васильев В.Г.* Многомерные обратные задачи для дифференциальных уравнений. Новосибирск.: Наука, 1969.
- 3. Романов В.Г. Обратные задачи математической физики. М.: Наука, 1984.
- 4. Денисов А.М. Введение в теорию обратных задач. М.: Изд-во МГУ, 1994.
- 5. *Prilepko A.I.*, *Orlovsky D.G.*, *Vasin I.V.* Methods for solving inverse problems in mathematical physics. New York: Marcel Dekker, 2000.
- 6. *Самарский А.А.*, *Вабищевич П.Н*. Численные методы решения обратных задач математической физики. М.: ЛКИ, 2009.
- 7. Кабанихин С.И. Обратные и некорректные задачи. Новосибирск: Сибирское научное издательство, 2008.
- 8. Hasanov A, Romanov V.G. Introduction to inverse problems for differential equations. New York: Springer, 2017.
- 9. *Бимуратов С.Ш., Кабанихин С.И.* Решение одномерной обратной задачи электродинамики методом Ньютона–Канторовича // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 1992. Т. 32. № 12. С. 1900—1915.
- 10. *Monch L*. A Newton method for solving inverse scattering problem for a sound-hard obstacle // Inverse problems. 1996. V. 12. № 3. P. 309–324.
- 11. *Kabanikhin S.I.*, *Scherzer O.*, *Shichlenin M.A.* Iteration method for solving a two-dimensional inverse problem for hyperbolic equation // J. of Inverse and Ill-Posed Problems. 2003. V. 11. № 1. P. 1−23.
- 12. *Гончарский А.В., Романов С.Ю.* Итерационные методы решения обратной задачи ультразвуковой томографии // Вычисл. методы и программирование. 2015. Т. 6. № 4. С. 464—475.

- 13. *Баев А.В.,Гаврилов С.В.* Итерационный метод решения обратной задачи рассеяния для системы уравнений акустики в слоисто-неоднородной среде с поглощением // Вестн. МГУ. Серия 15, Вычисл. матем. и кибернетика. 2018. № 2. С. 7—14.
- 14. *Денисов А.М.* Итерационный метод решения задачи определения коэффициента и источника в уравнении теплопроводности // Дифференц. ур-ния. 2022. Т. 58. № 6. С. 756—762.
- 15. *Тихонов А.Н., Жуховицкий А.А., Забежинский Я.Л.* Поглощение газа из тока воздуха слоем зернистого материала I // Ж. физ. химии. 1945. Т. 19. Вып. 6. С. 253–261.
- 16. Дубинин М.М. Кинетика и динамика физической адсорбции. М.: Наука, 1973.
- 17. Венецианов Е.В., Рубинштейн Р.Н. Динамика сорбции из жидких сред. М.: Наука, 1983.
- 18. Денисов А.М., Лукшин А.В. Математические модели однокомпонентной динамики сорбции. М.: Изд-во МГУ, 1989.
- 19. Коржов Е.Н. Математическое моделирование процессов реддокс-сорбции. Воронеж: Изд-во ВГУ, 2016.
- 20. *Денисов А.М., Туйкина С.Р.* О некоторых обратных задачах неравновесной динамики сорбции // Докл. АН СССР. 1984. Т. 276. № 1. С. 100–102.
- 21. *Lorenzi A., Paparoni E.* An inverse problem arising in the theory of absorption // Applicable Analysis. 1990. V. 36. № 3. P. 249–263.
- 22. *Muraviev D.N., Chanov A.V., Denisov A.M., Omarova F., Tuikina S.R.* A numerical method for calculating isotherms of ion exchange on impregnated sulfonate ion-exchangers based on data of dynamic experiments // Reactive Polymers. 1992. V. 17. № 1. P. 29–38.
- 23. *Denisov A.M.*, *Lamos H.* An inverse problem for a nonlinear mathematical model of sorption dynamics with mixed-diffusional kinetics// J. Inverse and III Posed Problems. 1996. V. 4. № 3. P. 191–202.
- 24. *Щеглов А.Ю*. Метод решения обратной граничной задачи динамики сорбции с учетом диффузии внутри зерна // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2002. Т. 42. № 4. С. 580—590.
- 25. *Denisov A.M., Lorenzi A.* Recovering an unknown coefficient in an absorption model with diffusion // J. Inverse and Ill Posed Problems. 2007. V. 15. № 6. P. 599–610.
- 26. *Tuikina S.R.*, *Solov'eva S.I.* Numerical solution of an inverse problem for a two-dimensional model of sorption dynamics // Comput. Math. and Modeling. 2012. V. 23. № 1. P. 34–41.
- 27. *Tuikina S.R.* A numerical method for the solution of two inverse problems in the mathematical model of redox sorption // Comput. Math. and Modeling. 2020. V. 31. № 1. P. 96–103.
- 28. *Денисов А.М.*, *Чжу Дунцинь*. Обратная задача для математической модели динамики сорбции с переменным кинетическим коэффициентом // Вестн. МГУ сер.15, Вычисл. матем. и кибернетика. 2022. № 4. С. 5—13.
- 29. Денисов А.М., Чжу Дунцинь. Существование двух решений обратной задачи для математической модели динамики сорбции // Дифференц. ур-ния. 2023. Т. 59. № 10. С. 1433—1437.

# ITERATIVE NUMERICAL METHODS FOR SOLVING THE PROBLEM OF DETERMINING THE COEFFICIENT IN THE MODEL OF SORPTION DYNAMICS

A. M. Denisov\*, Zhu Dongqin\*\*

119999 Moscow, Leninskie Gory, Moscow State University, Russia
\*e-mail: den@cs.msu.ru
\*\*e-mail: zhudq1002@163.com

Received: 02.04.2024 Revised: 21.05.2024 Accepted: 26.07.2024

**Abstract.** The inverse coefficient problem for a mathematical model of sorption dynamics is considered. The inverse problem is reduced to nonlinear operator equations with respect to an unknown function. These equations are used to construct and justify the convergence of iterative methods for solving the inverse problem. Examples of the application of the proposed iterative methods for the numerical solution of the inverse problem are given.

**Keywords:** inverse problem, sorption dynamics, nonlinear operator equations, iterative methods.