УДК 519.6:541.18

И.В. СЕРГИЕНКО, М.Р. ПЕТРИК, Ж. ФРЕССАР, С. ЛЕКЛЕРК

ВЫСОКОПРОДУКТИВНЫЕ МЕТОДЫ ИДЕНТИФИКАЦИИ ПАРАМЕТРОВ КОМПЕТИТИВНОЙ ДИФФУЗИИ В НЕОДНОРОДНЫХ СРЕДАХ НАНОПОРИСТЫХ ЧАСТИЦ

Аннотация. Рассмотрены вопросы создания высокопроизводительных методов идентификации путем построения малозатратных аналитических решений прямых и сопряженных задач. Построены явные выражения градиентов функцоналов-невязок для идентификации параметров переноса в нанопористых средах при известных суммарных распределениях массы в твердой и газообразной фазах адсорбированных веществ. Приведены результаты численных экспериментов.

Ключевые слова: математическая модель, компетитивная диффузия, идентификация параметров, прямая и сопряженная задачи, градиентный метод, операционный метод Хевисайда, градиент функционала-невязки, неоднородная среда, нанопористые частицы.

ВВЕДЕНИЕ

Применение математического моделирования к исследованию процессов массопереноса в нанопористых средах и материалах, широко используемых в различных областях (медицине, нефтехимии, космических технологиях и др.) позволяет создавать процессы, обеспечивающие высокое качество конечной продукции (степень очистки нефтепродуктов, питьевой воды и др.). Широкое внедрение современных компьютерных средств для исследования процессов в таких средах состоит не только в сложности построения адекватных математических моделей, но и в задании их параметров. Ранее в работах [6, 7, 15–18] рассматривались вопросы идентификации параметров задач массопереноса в нанопористых средах при известных распределениях масс вещества в твердой и газообразной фазах. Однако в силу сложности экспериментального разделения этих характеристик целесообразно использовать эффективные вычислительные алгоритмы идентификации параметров при известных суммарных массах в определенных направлениях зондирования исследуемых сред с использованием высокоскоростных аналитических методов с учетом наиболее существенных факторов кинетики переноса на макро- и микроуровне.

В настоящей статье рассматриваются вопросы создания высокопродуктивных методов идентификации путем построения малозатратных аналитических решений прямых и сопряженных задач и получения на их основе градиентов функционалов-невязок для идентификации параметров переноса в нанопористых средах при известных суммарных распределениях массы в твердой и газообразной фазах сорбируемых веществ.

ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНАЯ МОДЕЛЬ ИДЕНТИФИКАЦИИ СИСТЕМЫ КОМПЕТИТИВНОЙ ДИФФУЗИИ В НЕОДНОРОДНОЙ НАНОПОРИСТОЙ СРЕДЕ

Предлагаемая модель является аналогом бипористой модели [1–5]. Рассмотрим сложную систему компетитивного массопереноса двух диффундирующих компонент в неоднородной многослойной среде микрочастиц нанопористой структуры. Процессы диффузии в таких системах включают два типа массопереноса: диффузию в макропорах межчастичного пространства (intercrystallite space — межкристаллитное пространство) и диффузию в микро- и нанопорах частиц — кристаллитов (intracrystallite space — внутрикристаллитное пространство). Нанопористый слой толщиной l состоит из большого числа пористых частиц, рассматриваемых как микроструктуры сферической формы радиуса R $(0 < R < l < \infty)$, поглощающие компоненты адсорбата в газообразной фазе (рис. 1). Диффузия двух газов (бензола и гексана) осуществляется в осевом направлении z пространства макропор (от 1 до 0) и в радиальном пространстве микропор для каждой частицы (от R до 0). Рабочая нанопористая среда рассматривается как неоднородная, состоящая из N достаточно тонких слоев $\Delta l_k = l_k - l_{k-1}$ частиц с разными свойствами, расположенными перпендикулярно осевому направлению диффузии. Примем следующие допущения:

(i) градиенты концентраций в макропорах и микропорах эволюируют до наступления равновесия;

(ii) тепловые эффекты незначительны;

(iii) диффузия происходит согласно закону Генри;

(iv) все нанопористые частицы имеют одинаковый размер и плотно упакованы в каждом слое среды [2, 3].

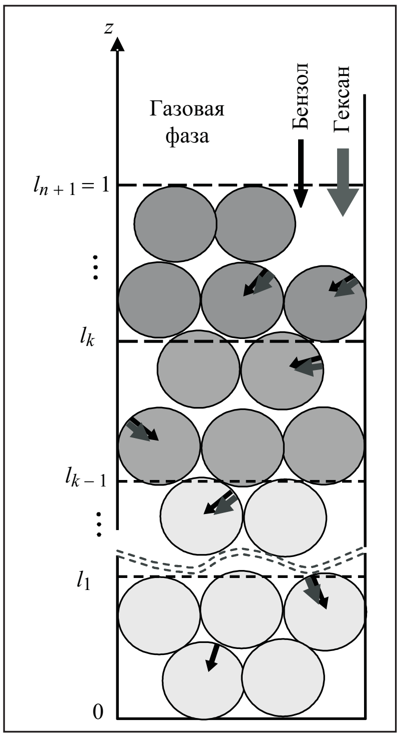

Рис. 1. Схема компетитивной диффузии в неоднородной среде нанопористых частиц

Предполагается, что коэффициенты компетитивной диффузии в межкристаллитном пространстве D_{inter_s} и внутрикристаллитном пространстве D_{intra_s}, $s = \overline{1, 2}$, являются неизвесными функциями. Математическая модель диффузии газов рассматриваемой нанопористой системы с учетом указанных физических факторов описана следующей начально-краевой задачей.

В областях $\Omega_{m_T} = (0, T) \times \Omega_m$ $(\Omega_m = (L_{m-1}, L_m))$, $m = \overline{1, N+1}$, $L_0 = 0 < L_1 < \ldots$ $\ldots < L_{N+1} = 1)$ концентрации адсорбированных масс $C_{s_m}(t, Z)$, $Q_{s_m}(t, X, Z)$ с учетом подходов, изложенных в [3, 6], удовлетворяют системе уравнений в частных производных

$$\frac{\partial C_{s_m}(t, Z)}{\partial t} = \frac{D_{\text{inter}_{s_m}}}{l^2} \frac{\partial^2 C_{s_m}}{\partial Z^2} - e_{\text{inter}_m} K_{s_m} \frac{D_{\text{intra}_{s_m}}}{R^2} \left(\frac{\partial Q_{s_m}}{\partial X} \right) \Bigg|_{X=1}, \qquad (1)$$

$$\frac{\partial Q_{s_m}(t, X, Z)}{\partial t} = \frac{D_{\text{intra}_{s_m}}}{R^2} \left(\frac{\partial^2 Q_{s_m}}{\partial X^2} + \frac{2}{X} \frac{\partial Q_{s_m}}{\partial X} \right). \qquad (2)$$

Начальные условия:

$$C_{s_m}(t = 0, Z) = 0; \; Q_{s_m}(t = 0, X, Z) = 0; \; X \in (0, 1), \; Z \in \Omega_m, \; m = \overline{1, N+1}, \qquad (3)$$

краевые и интерфейсные условия для концентрации массы переноса C:

$$C_{s_1}(t, L_1) = 1, \; \frac{\partial C_{s_1}}{\partial Z}(t, Z = 0) = 0, \; t \in (0, T); \qquad (4)$$

$$[C_{s_m}(t, Z) - C_{s_m}(t, Z)]_{Z = L_m} = 0,$$

$$\frac{\partial}{\partial Z}[D_{\text{inter}_{s_{m-1}}} C_{s_{m-1}}(t, Z) - D_{\text{inter}_{s_m}} C_{s_m}(t, Z)]_{Z = L_m} = 0, \; m = \overline{1, N}, \; t \in (0, T). \qquad (5)$$

Краевые условия в каждой точке $(t, Z) \subset \Omega_{m_T}$ для концентрации Q по радиусу частицы:

$$\frac{\partial}{\partial X} Q_{s_m}(t, X=0, Z)=0, \; Q_{s_m}(t, X=1, Z)=C_{s_m}(t, Z),$$
$$t \in (0, T), \; Z \in \Omega_m, \; m=\overline{1, N+1}. \tag{6}$$

Уравнение (1) описывает массоперенос в пространстве макропор, уравнение (2) определяет диффузию веществ в пространстве микропор сферических составляющих частиц радиусом R с центром в точке $Z \in \Omega_m$, $m=\overline{1, N+1}$.

На поверхностях наблюдений известны следующие суммарные распределения масс:

$$[C_{s_m}(t, Z)+\overline{Q}_{s_m}(t, Z)]\Big|_{\gamma_m} = M_{s_m}(t, Z)\Big|_{\gamma_m}, \; s=\overline{1, 2}, \; \gamma_m \in \Omega_m, \; t \in (0, T). \tag{7}$$

Выбор функционала-невязки. Функционал-невязку, который минимизирует отклонение модельного решения от значений экспериментального следа на $\gamma_m \in \Omega_m$, запишем в виде

$$J_s(D_{\mathrm{inter}_{s_m}}, D_{\mathrm{intra}_{s_m}}) = \frac{1}{2}\int_0^T [C_{s_m}(\tau, Z, D_{\mathrm{inter}_{s_m}}, D_{\mathrm{intra}_{s_m}}) +$$
$$+\overline{Q}_{s_m}(\tau, Z, D_{\mathrm{inter}_{s_m}}, D_{\mathrm{intra}_{s_m}}) - M_{s_m}(t, Z)]^2_{\gamma_m} d\tau, \; \gamma_m \in \Omega_m, \; m=\overline{1, N+1}. \tag{8}$$

В результате имеем задачу идентификации (1)–(7), состоящую в нахождении неизвестных функций $D_{\mathrm{intra}_s} \in \Omega_T$, $D_{\mathrm{inter}_s} \in \Omega_T$ ($D_{\mathrm{intra}_s} > 0$, $D_{\mathrm{inter}_s} > 0$, $s=\overline{1, 2}$). Адсорбированные массы $C_{s_m}(t, Z)+\overline{Q}_{s_m}(t, Z)$ удовлетворяют условиям (7) для каждой поверхности наблюдения $\gamma_m \subset \Omega_m$ каждого m-го сегмента нанопористой среды [17, 22, 8]. Здесь $Z = z/\ell$, $X = r/R$, $C = c/c_\infty$, $Q = q/q_\infty$; $e_{\mathrm{inter}_m} = \dfrac{\varepsilon_{\mathrm{inter}_m}}{(1-\varepsilon_{\mathrm{inter}_m})K_{s_m}}$; $e_{\mathrm{intra}_m} = 1 - e_{\mathrm{inter}_m}$; $K_{s_m} = \dfrac{q_{s_m\infty}}{c_{s_m\infty}}$; $\overline{Q}_s(t, Z) = \int_0^1 Q_s(t, X, Z) X \, dX$ — усредненная величина по радиусу частицы для s-й адсорбируемой компоненты ($s=\overline{1, 2}$) в микропорах; $M_s(t, Z)\Big|_{\gamma_m}$ — вектор экспериментальных данных (распределение адсорбированной массы в макро- и микропорах) на поверхности наблюдения $\gamma_m \subset \Omega_m$ (результаты NMR-анализа) [4]; c_s, q_s — концентрации адсорбатов в макро- и микропорах для s-й компоненты, $s=\overline{1, 2}$; D_{inter_s}, D_{intra_s} — коэффициенты диффузии в макро- и микропорах; K_s — константа адсорбционного равновесия, $\varepsilon_{\mathrm{inter}}$ — пористость; e_{inter} — коэффициент пористости; R — радиус частицы; ℓ — толщина рабочей области (слоя).

Постановка задачи в функциях *C* и *N*. Подстановка $N = XQ$ в (1)–(7) определяет задачу

$$\frac{\partial C_{s_m}(t, Z)}{\partial t} = \frac{D_{\mathrm{inter}_{s_m}}}{l^2} \frac{\partial^2 C_{s_m}}{\partial Z^2} - e_{\mathrm{inter}_m} K_{s_m} \frac{D_{\mathrm{intra}_{s_m}}}{R^2} \left(\frac{1}{X} \frac{\partial N_{s_m}}{\partial X} - \frac{1}{X^2} N_{s_m} \right)\Bigg|_{X=1},$$

$$\frac{\partial N_{s_m}(t, X, Z)}{\partial t} = \frac{D_{\mathrm{intra}_{s_m}}}{R^2} \frac{\partial^2 N_{s_m}}{\partial X^2}$$

с начальными условиями

$$C_{s_m}(t=0, Z)=0; \; N_{s_m}(t=0, X, Z)=0; \; X \in (0, 1), \; Z \in \Omega_m, \; m=\overline{1, N+1},$$

краевыми и интерфейсными условиями для координаты Z (4) и радиуса X

$$N_{s_m}(t, X=0, Z)=0,\ N_{s_m}(t, X=1, Z)=C_{s_m}(t, Z),\ t\in(0,T),\ Z\in\Omega_m,\ m=\overline{1, N+1},$$

и дополнительным условием наблюдения (7).

Проблема разрешимости задачи идентификации (1)–(7). Задача коэффициентной идентификаци диффузии в неоднородной нанопористой среде является сложной проблемой с определенными трудностями получения корректной постановки и построения единственного аналитического решения в силу влияния множества факторов (сложности учета влияющих параметров и физических эффектов, неполноты экспериментальных данных, погрешностей их измерений и др.). Согласно принципу регуляризации А.Н. Тихонова [12], развитого Ж.-Л. Лионсом [13], а также И.В. Сергиенко и В.С. Дейнекой [8, 19], подобные задачи идентификаци требуют пошагового уточнения решения по результатам экспериментальных наблюдений, минимизируя отклонения между модельными и экспериментальными значениями искомых физических параметров. Настоящая работа является обобщением подходов, изложенных нами в [3, 6, 7, 15–18]. Она позволяет уменьшить число итераций на 2–3 порядка для каждого цикла регуляризации и эффективно использовать такие подходы для более сложных систем и одновременного восстановления трех и более параметров.

Градиентный метод решения задачи коэффициентной идентификации. Решение задачи идентификации (1)–(7) сводится к задаче оптимизации функционала-невязки (8), постепенно совершенствуя решение посредством особой процедуры регуляризации с использованием высокоэффективных и скоростных градиентных методов. Градиентные методы в задачах идентификации на основе среднеквадратического функционала-невязки (цели, ошибки и т.д.) нашли практическое применение в работах Ж.-Л. Лионса [13], позже этот подход получил развитие в работах О.М. Алифанова (расчет температурных полей летательных аппаратов) [14] и работах авторов (задачи гидромеханики, фильтрации, диффузии и адсорбции и др.) [6, 15–17].

Следуя [8, 19] и используя градиентный метод минимизации погрешности для идентификации распределений коэффициентов диффузии во внутрикристаллитном $D_{\text{intra}_{s_m}}$ и межкристаллитном $D_{\text{inter}_{s_m}}$ пространствах как функций от времени для s-й диффундируемой компоненты, получаем регуляризационные выражения для $(n+1)$-го шага идентификации:

$$D^{n+1}_{\text{intra}_{s_m}}(t)=D^{n}_{\text{intra}_{s_m}}(t)-\nabla J^{n}_{D_{\text{intra}_{s_m}}}(t)\times$$

$$\times\frac{\left[C_{s_m}(D^n_{\text{inter}_{s_m}}, D^n_{\text{intra}_{s_m}}; t,\gamma_m)+\left(\dfrac{1}{X}\right)\Big|_{X=1/2} N_{s_m}\left(D^n_{\text{inter}_{s_m}}, D^n_{\text{intra}_{s_m}}; t,\dfrac{1}{2},\gamma_m\right)-M_{s_m}(t)\right]^2}{\|\nabla J^n_{D_{\text{intra}_{s_m}}}(t)\|^2+\|\nabla J^n_{D_{\text{inter}_{s_m}}}(t)\|^2},$$

$$t\in(0,T);$$

$$D^{n+1}_{\text{inter}_{s_m}}(t)=D^{n}_{\text{inter}_{s_m}}(t)-\nabla J^{n}_{D_{\text{inter}_{s_m}}}(t)\times$$

$$\times\frac{\left[C_{s_m}(D^n_{\text{inter}_{s_m}}, D^n_{\text{intra}_{s_m}}; t,\gamma_m)+\left(\dfrac{1}{X}\right)\Big|_{X=1/2} N_{s_m}\left(D^n_{\text{inter}_{s_m}}, D^n_{\text{intra}_{s_m}}; t,\dfrac{1}{2},\gamma_m\right)-M_{s_m}(t)\right]^2}{\|\nabla J^n_{D_{\text{intra}_{s_m}}}(t)\|^2+\|\nabla J^n_{D_{\text{inter}_{s_m}}}(t)\|^2},$$

$$t\in(0,T), \tag{9}$$

где $J_s(D_{\text{inter}_{s_m}}, D_{\text{intra}_{s_m}})$ — модифицированный функционал-невязка на поверхности $\gamma_m \in \Omega_m$:

$$J_s(D_{\text{inter}_{s_m}}, D_{\text{intra}_{s_m}}) = \frac{1}{2}\int_0^T \Bigg[C_{s_m}(\tau, Z, D_{\text{inter}_{s_m}}, D_{\text{intra}_{s_m}}) +$$

$$+\left(\frac{1}{X}\right)\Bigg|_{X=1/2} N_{s_m}\left(t, Z, D_{\text{inter}_{s_m}}, \frac{1}{2}, D_{\text{intra}_{s_m}}\right) - M_{s_m}(t)\Bigg]^2_{\gamma_m} d\tau,\ \gamma_m \in \Omega_m,\ m = \overline{1, N+1},$$

$\nabla J^n_{D_{\text{intra}_{s_m}}}(t)$, $\nabla J^n_{D_{\text{inter}_{s_m}}}(t)$ — компоненты градиента функционала-невязки $J(D_{\text{inter}_{s_m}}, D_{\text{intra}_{s_m}})$ для функций $D_{\text{intra}_s} \in \Omega_T$, $D_{\text{inter}_s} \in \Omega_T$, $\|\nabla J^n_{D_u}(t)\|^2 = \int_0^T [\nabla J^n_{D_u}(t)]^2 dt$ — квадрат нормы градиента функционала-невязки.

ПРЯМАЯ ЗАДАЧА ФУНКЦИОНАЛЬНОЙ ИДЕНТИФИКАЦИИ

Точное аналитическое решение прямой задачи (1)–(6) (для моделирования концентраций без учета условия (7) в допущении, что известны коэффициенты $D_{\text{intra}_{s_m}}$, $D_{\text{inter}_{s_m}}$) строится с использованием операционного метода Хевисайда в [7].

Для получения возможности идентифицировать параметры компетитивной диффузии (коэффициенты $D_{\text{intra}_{s_m}}$, $D_{\text{inter}_{s_m}}$) как функции от времени с использованием объемной базы экпериментальных данных пошарового NMR-сканирования рассмотрим трансформированную задачу (1)–(7) в виде системы $N+1$ краевых задач идентификации $D_{\text{intra}_{s_m}}$, $D_{\text{inter}_{s_m}}$ в каждой точке Z для каждого фрагмента Ω_m, $m = \overline{1, N+1}$, [17]

$$\frac{\partial C_{s_m}(t,Z)}{\partial t} = \frac{D_{\text{inter}_{s_m}}}{l^2}\frac{\partial^2 C_{s_m}}{\partial Z^2} - e_{\text{inter}_m} K_{s_m} \frac{D_{\text{intra}_{s_m}}}{R^2}\left(\frac{1}{X}\frac{\partial N_{s_m}}{\partial X} - \frac{1}{X^2}N_{s_m}\right)\Bigg|_{X=1}, \tag{10}$$

$$\frac{\partial N_{s_m}(t,X,Z)}{\partial t} = \frac{D_{\text{intra}_{s_m}}}{R^2}\frac{\partial^2 N_{s_m}}{\partial X^2},\ s = \overline{1,2},\ m = \overline{N+1, 1}, \tag{11}$$

с начальными условиями

$$C_{s_m}(t=0, Z) = 0;\ N_{s_m}(t=0, X, Z) = 0;\ X \in (0,1),\ Z \in \Omega_m,\ m = \overline{1, N+1}, \tag{12}$$

краевыми условиями для каждого m-го слоя

$$C_{s_m}(t, Z = L_m) = \theta_{s_m},$$

$$C_{s_{m-1}}(t, Z = L_{m-1}) = \theta_{s_{m-1}};\ s = \overline{1,2},\ m = \overline{N+1, 2},\ \theta_{s_{N+1}} = 1, \tag{13}$$

$$C_{s_1}(t, L_1) = \theta_{s_1},\quad \frac{\partial C_{s_1}}{\partial Z}(t, Z=0) = 0, \tag{14}$$

краевыми условиями для отдельной частицы

$$N_{s_m}(t, X=0, Z) = 0,\ N_{s_m}(t, X=1, Z) = C_{s_m}(t,Z),\ Z \in \Omega_m,\ m = \overline{1, N+1}, \tag{15}$$

$\Delta = L_m - L_{m-1}$, $m = \overline{1, N+1}$, θ_m — экспериментальный след $C_{s_m}(t)$ на сегментах, $\Delta\theta_m = \theta_m - \theta_{m-1}$, $m = \overline{1, N+1}$.

Аналитическое решение прямой задачи идентификации (10)–(15). Для нахождения аналитического решения прямой задачи (10)–(15), задаваемого функциями C_{s_m} и N_{s_m}, используем операционный метод Хевисайда [11, 10]. В предположении, что искомые функции C_{s_m} и N_{s_m} ($N_{s_m} = X \cdot Q_{s_m}$), как распределения концентраций от времени и координат, являются оригиналами по Лапласу [11]:

$$C^*_{s_m}(p,Z) = \int_0^\infty C_{s_m}(t,Z)\exp(-pt)dt, \quad N^*_{s_m}(p,X,Z) = \int_0^\infty N_{s_m}(t,X,Z)\exp(-pt)dt, \tag{16}$$

где p — комплекснозначный параметр преобразования Лапласа, получим

$$\frac{\partial^2 C^*_{s_m}}{\partial Z^2} = \frac{\Delta L^2}{D_{\text{inter}_{s_m}}} pC^*_{s_m} + \frac{3}{e_{\text{inter}_m}} \frac{\Delta L^2}{R^2} \frac{D_{\text{intra}_{s_m}}}{D_{\text{inter}_{s_m}}} \left(\frac{\partial N^*_{s_m}}{\partial X} - N^*_{s_m} \right)\Bigg|_{X=1}, \tag{17}$$

$$\frac{\partial^2 N^*_{s_m}}{\partial X^2} = \frac{R^2}{D_{\text{intra}_{s_m}}} pN^*_{s_m}. \tag{18}$$

Краевые условия для m-го слоя составляют

$$C^*_{s_m}(p, Z = L_m) = \frac{1}{P}\theta_{s_m},$$

$$C^*_{s_{m-1}}(p, Z = L_{m-1}) = \frac{1}{p}\theta_{s_{m-1}}; \quad s = \overline{1,2}, \quad m = \overline{N+1, 2}, \quad \theta_{s_{N+1}} = 1, \tag{19}$$

$$C^*_{s_1}(p, L_1) = \frac{1}{p}\theta_{s_1}, \quad \frac{\partial C^*_{s_1}}{\partial Z}(p, Z=0) = 0; \tag{20}$$

краевые условия для частицы составляют

$$N^*_{s_m}(p, X=1, Z) = C^*_{s_m}(Z), \quad \frac{\partial^2 N^*_{s_m}(p, X=0, Z)}{\partial X^2} = 0. \tag{21}$$

Решение задачи уравнения (18)–(21) имеет вид [9]

$$N^*_{s_m}(p,X,Z) = C^*_{s_m}(p,Z) \frac{\operatorname{sh}\left(R\sqrt{\frac{p}{D_{\text{intra}_{s_m}}}} X \right)}{\operatorname{sh}\left(R\sqrt{\frac{p}{D_{\text{intra}_{s_m}}}} \right)}, \quad s = \overline{1,2}, \quad m = \overline{1, N+1}, \tag{22}$$

$$C^*_{s_m}(p,Z) = \frac{1}{p \cdot \operatorname{sh}[\gamma_{s_m}(p)\Delta L]} (\theta_{s_m} \operatorname{sh}[\gamma_{s_m}(p)(Z - L_{m-1})] +$$

$$+ \theta_{s_{m-1}} \operatorname{sh}[\gamma_{s_m}(p)(L_m - Z)Z]), \quad m = \overline{N+1, 2},$$

$$C^*_{s1}(p,Z) = \frac{\theta_{s_1}}{p} \frac{\operatorname{ch}[\gamma_{s1}(p)Z]}{\operatorname{ch}[\gamma_{s1}(p)\Delta L]}, \quad m = 1, \tag{23}$$

где $\gamma^2_{s_m}(p) = \frac{3}{e_{\text{inter}_m}} \frac{\Delta L^2}{R^2} \frac{D_{\text{intra}_{s_m}}}{D_{\text{inter}_{s_m}}} \left(\frac{e_{\text{inter}_m}}{3} \frac{R^2}{D_{\text{intra}_{s_m}}} p + R\sqrt{\frac{p}{D_{\text{intra}_{s_m}}}} \operatorname{cth}\left(R\sqrt{\frac{p}{D_{\text{intra}_{s_m}}}} \right) - 1 \right)$.

Используя теорему Хевисайда о разложении в ряд изображений по Лапласу (23) по корням знаменателя и выполняя подстановку $p = -D_{\text{intra}_{s_m}} \beta^2 / R^2$, получаем формулы обращения к оригиналам указанных изображений [11]:

$$C_{s_m}(t,Z)=1+\sum_{n=1}^{\infty}\sum_{k=1}^{\infty}\frac{\theta_{s_m}\operatorname{sh}[\gamma_{s_m}(p_{kn})(Z-L_{m-1})]+\theta_{s_{m-1}}\operatorname{sh}[\gamma_{s_m}(p_{kn})(L_m-Z)]}{p_{kn}\frac{d}{ds}\operatorname{sh}[\gamma_{s_m}(p)\Delta L]\Big|_{p=p_{kn}=-\frac{D_{\text{intra}\,s_m}\beta_{kn}^2}{R^2}}}\exp(p_{kn}t),$$

$$m=\overline{2,\,N+1},$$

$$C_{s_1}(t,Z)=1+\sum_{n=1}^{\infty}\sum_{k=1}^{\infty}\frac{\operatorname{ch}[\gamma_{s_1}(p_{kn})Z]\exp(p_{kn}t)}{p_{kn}\frac{d}{dp}\operatorname{ch}[\gamma_{s_1}(p)\Delta L]\Big|_{p=p_{kn}=-\frac{D_{\text{intra}\,s_1}\beta_{kn}^2}{R^2}}},$$

где $\beta_{kn_1},\beta_{kn_m}$, $m=\overline{2,\infty}$, — корни соответствующих трансцендентных уравнений,

$$\gamma_{s1}^2(\beta)\equiv\frac{3}{e_{\text{inter}_1}}\frac{\Delta L^2}{R^2}\frac{D_{\text{intra}_{s_1}}}{D_{\text{inter}_{s_1}}}\left(\frac{e_{\text{inter}_1}}{3}\beta^2-\beta\operatorname{ctg}\beta+1\right)=\frac{2n-1}{2\Delta L}\pi,\quad n,k=\overline{1,\infty},$$

$$\gamma_{s_m}^2(\beta)\equiv\frac{3}{e_{\text{inter}_m}}\frac{\Delta L^2}{R^2}\frac{D_{\text{intra}_{s_m}}}{D_{\text{inter}_{s_m}}}\left(\frac{e_{\text{inter}_{s_m}}}{3}\beta^2-\beta\operatorname{ctg}\beta+1\right)=\frac{n\pi}{\Delta L},$$

$$n=\overline{0,\infty},\quad k=\overline{1,\infty},\quad m=\overline{2,\,N+1}.$$

После преобразований получаем

$$C_{s_m}(t,Z)=1+\frac{2\pi}{\Delta L}\frac{R^2}{D_{\text{intra}_{s_m}}}\frac{D_{\text{inter}_{s_m}}}{\Delta L^2}\times$$

$$\times\sum_{n=1}^{\infty}\sum_{k=1}^{\infty}\frac{\omega_{s_m}(n,Z)\exp\left(-\frac{D_{\text{intra}_{s_m}}\beta_{kn_m}^2}{R^2}t\right)}{(-1)^n\beta_{kn_m}^2\left(\frac{3}{e_{\text{inter}_m}}\left(\frac{1}{\sin^2(\beta_{kn_m})}-\frac{\operatorname{ctg}(\beta_{kn_m})}{\beta_{kn_m}}\right)+2\right)},$$

$$\omega_{s_m}(n,Z)=\begin{cases}(2n-1)\cos\left(\frac{2n-1}{2}\pi Z\right), & m=1,\\ n\left(\theta_{s_m}\sin\left[\frac{n\pi}{\Delta L}(Z-L_{m-1})\right]+\theta_{s_{m-1}}\sin\left[\frac{n\pi}{\Delta L}(L_m-Z)\right]\right), & m>1.\end{cases}$$

Преобразовав формулу (22) к виду

$$N_{s_m}^*(p,X,Z)=C_{s_m}^*(p,Z)\frac{\sin(\beta X)}{\sin(\beta)}\left(i\beta=R\sqrt{\frac{p}{D_{\text{intra}_{s_m}}}},\ \beta^2=-\frac{R^2}{D_{\text{intra}_{s_m}}}p\right),\quad m=\overline{1,N+1},$$

с учетом теоремы Хевисайда о разложении в ряд получаем формулы оригиналов по Лапласу функции $N_{s_m}^*(p,X,Z)$ [3, 11]:

$$N_{s_m}(t,X,Z)=1+\frac{2\pi}{\Delta L}\frac{R^2}{D_{\text{intra}_{s_m}}}\frac{D_{\text{inter}_{s_m}}}{\Delta L^2}\times$$

$$\times\sum_{n=1}^{\infty}\sum_{k=1}^{\infty}\frac{\omega_{s_m}(n,Z)\exp\left(-\frac{D_{\text{intra}_{s_m}}\beta_{kn_m}^2}{R^2}t\right)\cdot\sin(\beta_{kn_m}X)}{(-1)^n\beta_{kn_m}^2\sin(\beta_{kn_m})\left(\frac{3}{e_{\text{inter}_m}}\left(\frac{1}{\sin^2(\beta_{kn_m})}-\frac{\operatorname{ctg}(\beta_{kn_m})}{\beta_{kn_m}}\right)+2\right)}.$$

Построение расширенного функционала. Перейдем к безусловной экстремальной форме рассматриваемой задачи идентификации, вводя расширенный функционал [19]

$$\Phi(D_{\text{inter}_{s_m}}, D_{\text{intra}_{s_m}}) = J_s + I_{s_1} + I_{s_2}, \ s = \overline{1,2},$$

где I_{s_1}, I_{s_2} — составляющие, учитывающие специфику основных уравнений баланса (10) и (11) соответственно для выходной задачи идентификации (10)–(15):

$$I_{s_1} = \int_0^T \int_{L_{m-1}}^{L_m} \phi_{s_m}(t,Z) \left(\frac{\partial C_{s_m}}{\partial t} - \frac{D_{\text{inter}_{s_m}}}{l^2} \frac{\partial^2 C_{s_m}}{\partial Z^2} + \right.$$
$$\left. + e_{\text{inter}_m} K_{s_m} \frac{D_{\text{intra}_{s_m}}}{R} \left(\frac{\partial Q(t,X,Z)\big|_{s_m}}{\partial X} \right) \Bigg|_{X=1} \right) dZdt,$$

$$I_{s_2} = \int_0^T \int_0^1 \int_{L_{m-1}}^{L_m} \psi_{s_m}(t,X,Z) \left(\frac{\partial Q_{s_m}(t,X,Z)}{\partial t} - \frac{D_{\text{intra}_{s_m}}}{R^2} \left(\frac{\partial^2 Q_{s_m}}{\partial X^2} + \frac{2}{X} \frac{\partial Q_{s_m}}{\partial X} \right) \right) XdXdZdt.$$

Функционал-невязка J_s определяется формулой (9), ϕ_{s_m}, ψ_{s_m}, $s = \overline{1,2}$, — неизвестные множители Лагранжа, подлежащие определению [19], из условия стационарности функционала $\Phi(D_{\text{inter}_{s_p}}, D_{\text{intra}_{s_p}})$ (равенства нулю его полной вариации) [8, 14]:

$$\Delta\Phi(D_{\text{inter}_{s_m}}, D_{\text{intra}_{s_m}}) \equiv \Delta J_s + \Delta I_{s_1} + \Delta I_{s_2} = 0, \ s = \overline{1,2}. \tag{24}$$

Вычисление отдельных членов в (24) осуществляем в предположении, что величины $D_{\text{inter}_{s_m}}, D_{\text{intra}_{s_m}}$ получили приращения $\Delta D_{\text{inter}_{s_m}}, \Delta D_{\text{intra}_{s_m}}$. В результате концентрации $C_{s_m}(t,Z)$ изменяются на некоторые приращения величин $\Delta C_{s_m}(t,Z)$ $(v_{s_m}(t,Z))$, а концентрации $Q_{s_m}(t,X,Z)$ — на величины $\Delta Q_{s_m}(t,X,Z)$ $(w_{s_m}(t,X,Z))$, $s = \overline{1,2}$.

Постановка начально-краевой задачи в приращениях. Подставляя в исходную начально-краевую задачу (1)–(6) вместо $D_{\text{inter}_{s_p}}, D_{\text{intra}_{s_p}}$ и $C_{s_m}(t,Z)$, $Q_{s_m}(t,X,Z)$ соответствующие величины с приращениями $D_{\text{inter}_{s_p}} + \Delta D_{\text{inter}_{s_p}}$, $D_{\text{intra}_{s_p}} + \Delta D_{\text{intra}_{s_p}}$ и $C_{s_m}(t,Z) + \Delta C_{s_m}(t,z)$, $Q_{s_m}(t,X,Z) + \Delta Q_{s_m}(t,X,Z)$ и вычитая из преобразованных уравнений и условий задачи соответствующие компоненты уравнений и условий задачи (1)–(6), пренебрегая членами второго порядка малости, получаем постановку начально-краевой задачи в приращениях для определения величин $\Delta C_{s_m}(t,Z)$ $(v_{s_m}(t,Z))$ и $\Delta Q_{s_m}(t,X,Z)$ $(w_{s_m}(t,X,Z))$, $s = \overline{1,2}$:

$$\frac{\partial}{\partial t} \Delta C_{s_m}(t,Z) = \frac{\partial}{\partial z} \left(D_{\text{inter}_{s_m}} \frac{\partial}{\partial z} \Delta C_{s_m} \right) - e_{\text{inter}_m} \frac{D_{\text{intra}_{s_m}}}{R} \frac{\partial}{\partial X} \Delta Q_{s_m}(t,X,Z) \Bigg|_{X=1} +$$
$$+ \frac{\partial}{\partial z} \left(\Delta D_{\text{inter}_{s_m}} \frac{\partial}{\partial z} C_{s_m} \right) - e_{\text{inter}_m} \frac{D_{\text{intra}_{s_m}}}{R} \frac{\partial}{\partial X} Q_{s_m}(t,X,Z) \Bigg|_{X=1},$$

$$(X,Z) \in (0,1) \bigcup \Omega_m, \ m = \overline{1, n+1}; \tag{25}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\Delta Q_{s_m}(t,X,Z)=\frac{D_{\text{intra}_{s_m}}}{R^2}\left(\frac{\partial^2}{\partial X^2}+\frac{2}{X}\frac{\partial}{\partial X}\right)\Delta Q_{s_m}+$$

$$+\frac{\Delta D_{\text{intra}_{s_m}}}{R^2}\left(\frac{\partial^2}{\partial X^2}+\frac{2}{X}\frac{\partial}{\partial X}\right)Q_{s_m},\ m=\overline{1,n+1}; \tag{26}$$

$$\Delta C_{s_m}(t,Z)\big|_{t=0}=0,\ \Delta Q_{s_m}(t,X,Z)\big|_{t=0}=0,\ X\in(0,1),\ Z\in\Omega_m,\ m=\overline{1,n+1}; \tag{27}$$

$$\frac{\partial}{\partial X}\Delta Q_{s_m}(t,X,Z)\bigg|_{X=0}=0,\ \Delta Q_{s_m}(t,X,z)\big|_{X=1}=\Delta C_{s_m}(t,Z),$$

$$Z\in\Omega_m,\ m=\overline{1,n+1},\ t\in(0,T),$$

$$\Delta C_{s_m}(t,Z=L_m)=0,\ \Delta C_{s_{m-1}}(t,Z=L_{m-1})=0;\ s=\overline{1,2},\ m=\overline{N+1,2},$$

$$\Delta C_{s_1}(t,Z)\big|_{Z=L_1}=0,\ \frac{\partial}{\partial Z}C_{s_1}(t,Z)\big|_{Z=0}=0. \tag{28}$$

Вычисление приращений расширенного функционала. В предположении, что искомые вектор-функции $(C_{s_m}(t,Z)+\Delta C_{s_m}(t,z),\ Q_{s_m}(t,X,Z)+\Delta Q_{s_m}(t,X,Z))$ получили приращения (вариации) по всем составляющим расширенного функционала $\Phi(D_{\text{inter}_{s_m}},D_{\text{intra}_{s_m}})$, пренебрегая членами второго порядка малости, определяем:

— приращение функционала-невязки (9):

$$\Delta J_s(D_{\text{inter}_{s_m}},D_{\text{intra}_{s_m}})=\int_0^T\int_{L_{m-1}}^{L_m}E_{s_m}(t)\delta(Z-\gamma_m)(\Delta C_{s_m}(t)+\Delta\overline{Q}_{s_m}(t))dZdt+$$

$$+O(\max_m|\Delta C_{s_m},\Delta\overline{Q}_{s_m}|), \tag{29}$$

где $E_{s_m}(t)=C_{s_m}(D_{\text{intra}_{s_m}},D_{\text{inter}_{s_m}};t,\gamma_m)+\overline{Q}_{s_m}(D_{\text{intra}_{s_m}},D_{\text{inter}_{s_m}};t,\gamma_m)-M_{s_m}(t)$;

— приращения составляющих функционала I_{s_1},I_{s_2} (в результате интегрирования по частям с использованием начальных и краевых условий прямой задачи (1)–(6)):

$$\Delta I_{s_1}=\int_0^T\int_{L_{m-1}}^{L_m}\left(\frac{\partial\phi_{s_m}(t,Z)}{\partial t}+\frac{D_{\text{inter}_{s_m}}}{l^2}\frac{\partial^2\phi_{s_m}}{\partial Z^2}+\right.$$

$$\left.+e_{\text{inter}_m}K_{s_m}\frac{D_{\text{intra}_{s_m}}}{R}\frac{\partial\psi_{s_m}(t,X,Z)}{\partial X}\bigg|_{X=1}\right)\Delta C_{s_m}dZdt, \tag{30}$$

$$\Delta I_{s_2}=\int_0^T\int_{L_{m-1}}^{L_m}\int_0^1\left(\frac{\partial\psi_{s_m}(t,X,Z)}{\partial t}+\frac{D_{\text{intra}_{s_m}}}{R^2}\left(\frac{\partial^2}{\partial X^2}+\frac{2}{X}\frac{\partial}{\partial X}\right)\psi_{s_m}\right)\Delta Q_{s_m}XdXdZdt. \tag{31}$$

Постановка сопряженной краевой задачи. В соответствии с исходной начально-краевой задачей (1)–(6) с учетом (24) и (29)–(31) для каждого приближения $D^n_{\text{intra}_{s_m}},D^n_{\text{inter}_{s_m}}$ решения $D_{\text{intra}_{s_m}},D_{\text{inter}_{s_m}}$ получаем постановку сопряженной краевой задачи:

$$\frac{\partial\phi_{s_m}(t,Z)}{\partial t}+\frac{D_{\text{inter}_{s_m}}}{l^2}\frac{\partial^2\varphi_{s_m}}{\partial Z^2}+e_{\text{inter}_m}K_{s_m}\frac{D_{\text{intra}_{s_m}}}{R}\frac{\partial\psi_{s_m}(t,X,Z)}{\partial X}\bigg|_{X=1}=$$

$$=E^n_{s_m}(t)\delta(Z-\gamma_m); \tag{32}$$

$$\frac{\partial\psi_{s_m}(t,X,Z)}{\partial t}+\frac{D_{\text{intra}_{s_m}}}{R^2}\left(\frac{\partial^2}{\partial X^2}+\frac{2}{X}\frac{\partial}{\partial X}\right)\psi_{s_m}=E^n_{s_m}(t)\delta(Z-\gamma_m); \tag{33}$$

$$\phi_{s_m}(t,Z)\Big|_{t=T}=0;\ \psi_{s_m}(t,X,Z)\Big|_{t=T}=0 \text{ (при } t=T); \tag{34}$$

$$\frac{\partial}{\partial X}\psi_{s_m}(t,X,Z)\Bigg|_{X=0}=0;\ \psi_{s_m}(t,X,Z)\Big|_{X=1}=\phi_{s_m}(t,Z); \tag{35}$$

$$\phi_{s_m}(t,Z=L_m)=0,\ \phi_{s_{m-1}}(t,Z=L_{m-1})=0;\ s=\overline{1,2},\ m=\overline{N+1,2}, \tag{36}$$

$$\phi_{s_1}(t,L_1)=0,\ \frac{\partial\phi_{s_1}}{\partial Z}(t,Z=0)=0,$$

где $E^n_{s_m}(t)=C_{s_m}(D^n_{\text{intra}_{s_m}},D^n_{\text{inter}_{s_m}};t,\gamma_m)+\overline{Q}_{s_m}(D^n_{\text{intra}_{s_m}},D^n_{\text{inter}_{s_m}};t,\gamma_m)-M_{s_m}(t)$.

Определение 1. Обобщенным решением сопряженной краевой задачи (32)–(36) является вектор-функция $\Psi_{s_m}=(\phi_{s_m}(t,Z),\ \psi_{s_m}(t,X,Z))\in H^0_1\times H_2$, которая $\forall(\Delta C_{s_m},\Delta Q_{s_m})\in H^0_1\times H_2$ удовлетворяет равенствам [19]:

$$-\int\limits_{L_{m-1}}^{L_m}\frac{\partial\phi_{s_m}(t,Z)}{\partial t}\Delta C_{s_m}dZ+\int\limits_{L_{m-1}}^{L_m}\frac{D_{\text{inter}_{s_m}}}{l^2}\frac{\partial\phi_{s_m}}{\partial Z}\frac{\partial}{\partial z}\Delta C_{s_m}dZ+$$

$$+e_{\text{inter}_m}K_{s_m}\frac{D_{\text{intra}_{s_m}}}{R}\int\limits_{L_{m-1}}^{L_m}\int\limits_0^1\frac{\partial\Delta Q_{s_m}(t,X,Z)}{\partial X}\psi_{s_m}X\,dX\Bigg|_{X=1}dZ=E^n_{s_m}(t)\Delta C_{s_m}(t,Z),$$

$$\int\limits_0^1\frac{\partial\psi_{s_m}(t,X,Z)}{\partial t}\Delta Q_{s_m}dX+\int\limits_0^1\frac{D_{\text{intra}_{s_m}}}{R^2}\frac{\partial\psi_{s_m}}{\partial X}\frac{\partial\Delta_{s_m}}{\partial X}XdX=\Delta Q_{s_m}(t,1/2,Z)\delta(Z-\gamma_m). \tag{37}$$

Построение аналитического решения сопряженной задачи. Для построения решения ϕ_{s_m} и ψ_{s_m} сопряженной краевой задачи (32)–(36) используем операционный метод Хевисайда [11]. В предположении, что искомые функции ϕ_{s_m} и ψ_{s_m} ($\Psi_{s_m}=X\cdot\psi_{s_m}$) являются оригиналами по Лапласу, при замене $t=t-T$ получим

$$\frac{\partial^2\phi^*_{s_m}}{\partial Z^2}+\frac{\Delta L^2}{D_{\text{inter}_{s_m}}}p\phi^*_{s_m}+\frac{3}{e_{\text{inter}_m}}\frac{\Delta L^2}{R^2}\frac{D_{\text{intra}_{s_m}}}{D_{\text{inter}_{s_m}}}\left(\frac{\partial\Psi^*_{s_m}}{\partial X}-\Psi^*_{s_m}\right)\Bigg|_{X=1}=$$

$$=\frac{\Delta L^2}{D_{\text{inter}_{s_m}}}E^{n*}_{s_m}(p)\delta(Z-\gamma_m), \tag{38}$$

$$\frac{\partial^2\Psi^*_{s_m}}{\partial X^2}+\frac{R^2}{D_{\text{intra}_{s_m}}}p\Psi^*_{s_m}=\frac{R^2}{D_{\text{intra}_{s_m}}}E^{n^*}_{s_m}(p)\delta(Z-\gamma_m) \tag{39}$$

с краевыми условиями

$$\Psi^*_{s_m}(p,X,Z)\Big|_{X=0}=0;\ \Psi^*_{s_m}(p,X,Z)\Big|_{X=1}=\phi^*_{s_m}(p,Z), \tag{40}$$

$$\phi^*_{s_m}(p,Z=L_m)=0,\ \phi^*_{s_{m-1}}(p,Z=L_{m-1})=0;\ s=\overline{1,2},\ m=\overline{N+1,2},$$

$$\phi^*_{s_1}(p,L_1)=0,\ \frac{\partial\phi^*_{s_1}}{\partial Z}(p,Z=0)=0, \tag{41}$$

где $\phi^*_{s_m}(p,Z)=\int\limits_0^\infty\phi_{s_m}(t,Z)e^{-pt}dt,\ \Psi^*_{s_m}(p,X,Z)=\int\limits_0^\infty\Psi_{s_m}(t,X,Z)e^{-pt}dt.$

Единственное решение задачи (39), (40) построено методом Коши [9, 10] в виде

$$\Psi^*_{s_m}(p,X,Z)=\phi^*_{s_m}(p,Z)\frac{\sin(\beta X)}{\sin\beta}+$$

$$+\frac{R^2}{D_{\text{intra}_{s_m}}}\mathcal{IE}^*_{s_m}(p,X)E^{n*}_{s_m}(p)\delta(Z-\gamma_m),\ \ s=\overline{1,2},\ \ m=\overline{1,N+1},\tag{42}$$

$$\mathcal{IE}^*_{s_m}(p,X)=-\frac{1}{\beta^2\sin\beta}(\sin\beta X[1-\cos\beta(1-X)]-\sin\beta(1-X)[1-\cos\beta X]),$$

$$\beta(p)=R\sqrt{\frac{p}{D_{\text{intra}_{s_m}}}}.$$

Подставив решение (42) в уравнение (38), после преобразований получим

$$\frac{\partial^2\phi^*_{s_m}}{\partial Z^2}+\gamma^2_{s_m}(p)\phi^*_{s_m}(p,Z)=\frac{\Delta L^2}{D_{\text{inter}_{s_m}}}E^{n*}_{s_m}(p)\delta(Z-\gamma_m),\tag{43}$$

где $\gamma^2_{s_m}(p)=\frac{3}{e_{\text{inter}_m}}\frac{D_{\text{intra}_{s_m}}}{D_{\text{inter}_{s_m}}}\frac{\Delta L^2}{R^2}\left[\frac{e_{\text{inter}_m}}{3}\beta^2+\beta\operatorname{ctg}\beta-1\right].$

Единственное решение задачи (40), (41), (43) построено методом Коши [9, 10] в виде

$$\phi^*_{s_1}(p,Z)=-\frac{\Delta L^2}{D_{\text{inter}_{s_1}}}\frac{1}{\gamma_{s_1}\cos(\gamma_{s_1}\Delta L)}[\sin\gamma_{s_1}(L_1-h_1)\cos(\gamma_{s_1}Z)+$$

$$+\sin\gamma_{s_1}(L_1-Z)\cos(\gamma_{s_1}h_1)]E^{n*}_{s_1}(p),\tag{44}$$

$$\phi^*_{s_m}(p,Z)=-\frac{\Delta L^2}{D_{\text{inter}_{s_m}}}\frac{1}{\gamma_{s_m}\sin(\gamma_{s_m}\Delta L)}[\sin\gamma_{s_m}(Z-L_{m-1})\sin\gamma_{s_m}(L_m-h_m)+$$

$$+\sin\gamma_{s_m}(h_m-L_{m-1})\sin\gamma_{s_m}(L_m-Z)]E^{n*}_{s_m}(p),$$

$$h_m=\frac{L_m-L_{m-1}}{2},\ \ s=\overline{1,2},\ \ m=\overline{2,N+1}.$$

Переход к оригиналам функции $\varphi_{s_m}(t,Z)$. Преобразуем выражения (44) к оригиналам [11]:

$$\phi_{s_m}(t,Z)=-\frac{\Delta L^2}{D_{\text{inter}_{s_m}}}\int_0^t\mathcal{H}^{\text{inter}}_{s_m}(t-\tau,Z)E^n_{s_m}(\tau)d\tau,\ \ s=\overline{1,2},\ \ m=\overline{1,N+1},\tag{45}$$

$$\mathcal{H}^{\text{inter}}_{s_m}(t,Z)=L^{-1}\left[\frac{1}{\gamma_{s_m}(p)}\right]*L^{-1}\left[\frac{1}{\sin(\gamma_{s_m}\Delta L)}(\sin\gamma_{s_m}(Z-L_{m-1})\sin\gamma_{s_m}(L_m-h_m)+\right.$$

$$\left.+\sin\gamma_{s_m}(h_m-L_{m-1})\sin\gamma_{s_m}(L_m-Z))\right],\ \ s=\overline{1,2},\ \ m=\overline{2,N+1},\tag{46}$$

символ * означает оператор свертки двух функций [11].

После последовательного использования теоремы Хевисайда в изображениях по Лапласу в (46) и интегрирования получим оригинал [11]

$$\mathcal{H}^{\text{inter}}_{s_m}(t,Z)=\frac{4R^2}{\Delta L^2}\frac{e_{\text{inter}_m}}{3}\frac{D_{\text{inter}_{s_m}}}{D_{\text{intra}_{s_m}}}\sum_{n=0}^{\infty}\sum_{i=1}^{\infty}\sum_{k=1}^{\infty}\frac{\sqrt{\frac{e_{\text{inter}_m}}{3}+\frac{\operatorname{ctg}\tilde\beta_{s_{m_i}}}{\tilde\beta_{s_{m_i}}}-\frac{1}{\tilde\beta^2_{s_{m_i}}}}}{\left[\frac{\operatorname{ctg}\tilde\beta_{s_{m_i}}}{\tilde\beta_{s_{m_k}}}-\frac{1}{\sin^2\tilde\beta_{s_{m_i}}}+\frac{2e_{\text{inter}_m}}{3}\right]}\times$$

$$\times\frac{\sqrt{\left(\frac{e_{\text{inter}_m}}{3}+\frac{\operatorname{ctg}\beta_{s_{m_{kn}}}}{\beta_{s_{m_{kn}}}}-\frac{1}{\beta_{s_{m_{kn}}}}\right)}B_{s_m}(Z,\beta_{s_{m_{kn}}})}{\Delta L\left[\frac{\operatorname{ctg}\beta_{s_{m_{kn}}}}{\beta_{s_{m_{kn}}}}-\frac{1}{\sin^2\beta_{s_{m_{kn}}}}+\frac{2e_{\text{inter}_m}}{3}\right](-1)^n}\cdot\frac{\exp\left(\frac{D_{\text{intra}_{s_m}}}{R^2}\beta^2_{s_{m_{kn}}}t\right)-\exp\left(\frac{D_{\text{intra}_{s_m}}}{R^2}\tilde\beta^2_{s_{m_i}}t\right)}{\frac{D_{\text{intra}_{s_m}}}{R^2}(\tilde\beta^2_{s_{m_i}}-\beta^2_{s_{m_{kn}}})}.$$

Здесь $\widetilde{\beta}_{s_{m_i}}$ — корни трансцендентного уравнения $\frac{e_{\mathrm{inter}_1}}{3}\beta^2-\beta\operatorname{ctg}\beta+1=0$, $p_{s_{m_i}}=\frac{D_{\mathrm{intra}_{s_m}}}{R^2}\widetilde{\beta}^2_{s_{m_i}}$; $\beta_{s_{m_{kn}}}$, $\beta_{s_{1_{kn}}}$ — корни соответственно трансцендентных уравнений

$$\frac{e_{\mathrm{inter}_m}}{3}\beta^2-\beta\operatorname{ctg}\beta+\left(1-\frac{e_{\mathrm{inter}_m}\Delta L^2}{R^2}\frac{D_{\mathrm{intra}_{s_m}}}{D_{\mathrm{inter}_{s_m}}}\frac{n}{\Delta L}\pi\right)=0,\ n=\overline{0,\infty},\ m=\overline{2,N+1},$$

$$\frac{e_{\mathrm{inter}_1}}{3}\beta^2-\beta\operatorname{ctg}\beta+\left(1-\frac{e_{\mathrm{inter}_1}\Delta L^2}{R^2}\frac{D_{\mathrm{intra}_{s_1}}}{D_{\mathrm{inter}_{s_1}}}\frac{2n-1}{2\Delta L}\pi\right)=0,\ n=\overline{1,\infty},$$

$$B_{s_m}(Z,\beta_{s_{m_{kn}}})=\sin\gamma_{s_m}(Z-L_{m-1})\sin\gamma_{s_m}(L_m-h_m)+\sin\gamma_{s_m}(h_m-L_{m-1})\sin\gamma_{s_m}(L_m-Z).$$

Переход к оригиналам функции $\Psi_{s_m}(t,X,Z)$. Оригинал $\Psi_{s_m}(t,X,Z)$ согласно теореме Хевисайда о разложении [11, 10] вычисляем в виде

$$\Psi_{s_m}(t,X,Z)=-\frac{\Delta L^2}{D_{\mathrm{inter}_{s_m}}}\int_0^t(\mathcal{H}^{\mathrm{intra}}_{s_m}(t-\tau,X,Z)+\mathcal{IE}_{s_m}(t-\tau,X)\delta(Z-\gamma_m))E^n_{s_m}(\tau)d\tau,$$

$$s=\overline{1,2},\ m=\overline{1,N+1},$$

$$\mathcal{IE}_{s_m}(t,X)=L^{-1}[\mathcal{IE}^*_{s_m}(p,X)]=-\frac{D_{\mathrm{intra}_m}}{R^2}\left[1+\sum_{i=1}^{\infty}(-1)^i(\sin\bar{\beta}_{s_{m_i}}X[1-\cos\bar{\beta}_{s_{m_i}}(1-X)]-\right.$$
$$\left.-\sin\bar{\beta}_{s_{m_i}}(1-X)[1-\cos\bar{\beta}_{s_{m_i}}X])\exp(\bar{\beta}^2_{s_{m_i}})\right],$$

$$\mathcal{H}^{\mathrm{intra}}_{s_m}(t,Z)=\frac{4R^2}{\Delta L^2}\frac{e_{\mathrm{inter}_m}}{3}\frac{D_{\mathrm{inter}_{s_m}}}{D_{\mathrm{intra}_{s_m}}}\sum_{n=0}^{\infty}\sum_{i=1}^{\infty}\sum_{k=1}^{\infty}\frac{\sqrt{\frac{e_{\mathrm{inter}_m}}{3}+\frac{\operatorname{ctg}\widetilde{\beta}_{s_{m_i}}}{\widetilde{\beta}_{s_{m_i}}}-\frac{1}{\widetilde{\beta}^2_{s_{m_i}}}}}{\left[\frac{\operatorname{ctg}\widetilde{\beta}_{s_{m_i}}}{\widetilde{\beta}_{s_{m_k}}}-\frac{1}{\sin^2\widetilde{\beta}_{s_{m_i}}}+\frac{2e_{\mathrm{inter}_m}}{3}\right]}\times$$

$$\times\frac{\sqrt{\left(\frac{e_{\mathrm{inter}_m}}{3}+\frac{\operatorname{ctg}\beta_{s_{m_{kn}}}}{\beta_{s_{m_{kn}}}}-\frac{1}{\beta_{s_{m_{kn}}}}\right)}B_{s_m}(Z,\beta_{s_{m_{kn}}})}{\Delta L\left[\frac{\operatorname{ctg}\beta_{s_{m_{kn}}}}{\beta_{s_{m_{kn}}}}-\frac{1}{\sin^2\beta_{s_{m_{kn}}}}+\frac{2e_{\mathrm{inter}_m}}{3}\right](-1)^n}\frac{\sin(\beta_{s_{m_{kn}}}X)}{\sin(\beta_{s_{m_{kn}}})}\times$$

$$\times\frac{\exp\left(\frac{D_{\mathrm{intra}_{s_m}}}{R^2}\beta^2_{s_{m_{kn}}}t\right)-\exp\left(\frac{D_{\mathrm{intra}_{s_m}}}{R^2}\widetilde{\beta}^2_{s_{m_i}}t\right)}{\frac{D_{\mathrm{intra}_{s_m}}}{R^2}(\widetilde{\beta}^2_{s_{m_i}}-\beta^2_{s_{m_{kn}}})}.$$

Установление взаимосвязи между решениями прямой и сопряженной задачами. Запишем основные уравнения краевой задачи в приращениях (25)–(28) и сопряженной краевой задачи (32)–(36) в операторной форме:

$$\mathcal{L}w_{s_m}(t,X,Z)=\mathrm{X}_{s_m},\ w_{s_m}\in(0,1)\cup\Omega_{m_T},\ m=\overline{1,n+1},$$

$$\mathcal{L}^*\Psi_{s_m}(t,X,Z)=E_{s_m}(t)\delta(Z-\gamma_m),\ \Psi_{s_m}\in(0,1)\cup\Omega_{m_T},\ m=\overline{1,n+1}.$$

Здесь

$$\mathcal{L}=\begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial t}-\frac{\partial}{\partial Z}\left(D_{\text{inter}_{s_m}}\frac{\partial}{\partial Z}\right) & e_{\text{inter}_m}\frac{D_{\text{intra}_{s_m}}}{R}\frac{\partial}{\partial X}\Big|_{X=1} \\ 0 & \frac{\partial}{\partial t}-\frac{D_{\text{intra}_{s_m}}}{R^2}\left(\frac{\partial^2}{\partial X^2}+\frac{2}{X}\frac{\partial}{\partial X}\right) \end{bmatrix},$$

$$\mathcal{L}^*=\begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial Z}\left(D_{\text{inter}_{s_m}}\frac{\partial}{\partial Z}\right) & e_{\text{inter}_m}\frac{D_{\text{intra}_{s_m}}}{R}\frac{\partial}{\partial X}\Big|_{X=1} \\ 0 & \frac{\partial}{\partial t}+\frac{D_{\text{intra}_{s_m}}}{R^2}\left(\frac{\partial^2}{\partial X^2}+\frac{2}{X}\frac{\partial}{\partial X}\right) \end{bmatrix},$$

$$w_{s_m}(t,X,Z)=\begin{bmatrix}\Delta C_{s_m}(t,Z)\\ \Delta Q_{s_m}(t,X,Z)\end{bmatrix},\;\; \Psi_{s_m}(t,X,Z)=\begin{bmatrix}\phi_{s_m}(t,Z)\\ \psi_{s_m}(t,X,Z)\end{bmatrix},$$

$$\mathrm{X}_{s_m}(t,X,Z)=\begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial Z}\left(\Delta D_{\text{inter}_{s_m}}\frac{\partial}{\partial Z}C_{s_m}\right)-e_{\text{inter}_m}\frac{\Delta D_{\text{intra}_{s_m}}}{R}\frac{\partial}{\partial X}Q_{s_m}(t,X,Z)\Big|_{X=1} \\ \frac{D_{\text{intra}_{s_m}}}{R^2}\left(\frac{\partial^2}{\partial X^2}+\frac{2}{X}\frac{\partial}{\partial X}\right)Q_{s_m}(t,X,Z) \end{bmatrix}, \quad (47)$$

где $\mathcal{L}^*$ — оператор, сопряженный с исходным оператором $\mathcal{L}$.

Определение скалярного произведения. Рассматривая $\mathcal{L}$ как оператор, отображающий Ω_{m_T} в пространство L_2; для элементов $\mathcal{L}w,\ \Psi\in L_2$ определим скалярное произведение

$$(\mathcal{L}w_{s_m}(t,X,Z),\Psi_{s_m}(t,X,Z))=$$

$$=\left[\iint\limits_{\Omega_{m_T}}\mathcal{L}\Delta C_{s_m}(t,Z)\phi_{s_m}(t,Z)\,dZdt\quad \iiint\limits_{(0,R)\cup\Omega_{m_T}}\mathcal{L}\Delta Q_{s_m}(t,X,Z)\psi_{s_m}(t,X,Z)XdXdZdt\right], \quad (48)$$

где $\phi_{s_m}(t,Z)$ и $\psi_{s_m}(t,X,Z)$ принадлежат $\overline{\Omega}_{m_T}$ и $[0,R]\cup\overline{\Omega}_{m_T}$ соответственно.

Для скалярного произведения (48) имеет место тождество Лагранжа [19, 14]

$$(\mathcal{L}w_{s_m}(t,X,Z),\Psi_{s_m}(t,X,Z))=(w_{s_m}(t,X,Z),\mathcal{L}^*\Psi_{s_m}(t,X,Z)). \quad (49)$$

Преобразовав приращение функционала-невязки в виде

$$\Delta J_s(D_{\text{inter}_{s_p}},D_{\text{intra}_{s_p}})=\int_0^T\int_{L_{m-1}}^{L_m}E_{s_m}(t)\Delta C_{s_m}\delta(Z-\gamma_m)\,dZdt+$$

$$+\int_0^T\int_{L_{m-1}}^{L_m}\int_0^1 E_{s_m}(t)\Delta Q_{s_m}\delta(Z-\gamma_m)\,XdXdZdt+O(\max|\Delta C_{s_m},\Delta Q_{s_m}|)$$

и использовав замену $w_{s_m}=\mathcal{L}^{-1}X_{s_m}$, где $\mathcal{L}^{-1}$ — оператор, обратный оператору $\mathcal{L}$, получим

$$\Delta J_s(D_{\text{intra}_{s_p}},D_{\text{inter}_{s_p}})=\int_0^T\int_{L_{m-1}}^{L_m}\mathcal{L}^{-1}X_{s_{m1}}(t,Z)E_{s_m}(t)\delta(Z-\gamma_m)\,dZdt+$$

$$+\int_0^T\int_{L_{m-1}}^{L_m}\int_0^1\mathcal{L}^{-1}X_{s_{m2}}(t,X,Z)E_{s_m}(t)\delta(Z-\gamma_m)XdXdZdt+O(\max|\Delta C_{s_m},\Delta Q_{s_m}|). \quad (50)$$

Пренебрегая в (50) бесконечно малыми величинами второго порядка, с учетом (49) и равенства $\mathcal{L}^{-1*}[E_{s_m}(t)\delta(Z-\gamma_m)]=\Psi_{s_m}$ получим приращение функционала-невязки, выраженное через решение сопряженной задачи, и вектор уравнений правых частей (47) задачи (25)–(28):

$$\Delta J_s(D_{\text{inter}_{s_m}}, D_{\text{intra}_{s_m}}) =$$
$$=(\mathrm{X}_{s_m}(t,X,Z), \mathcal{L}^{-1*}[E_{s_m}(t)\delta(Z-\gamma_m)])=(\Psi_{s_m}(t,X,Z), \mathrm{X}_{s_m}(t,X,Z)), \quad (51)$$

где $\mathcal{L}^{-1*}$ — оператор, сопряженный обратному оператору $\mathcal{L}^{-1}$, Ψ_{s_m} — вектор решений сопряженной задачи (32)–(36).

Получение аналитических выражений компонентов градиентов функционала-невязки. Раскрывая в уравнении (51) компоненты $\mathrm{X}_{s_m}(t,X,Z)$, с учетом равенства (47) получим важную формулу, определяющую взаимосвязь между прямой и сопряженной задачами (5)–(10) и (32)–(36), что в итоге дает возможность получить явные аналитические выражения градиентов функционала-невязки:

$$\Delta J_s(D_{\text{intra}_{s_p}}, D_{\text{inter}_{s_p}}) =$$
$$=\left(\varphi_{s_m}(t,Z), \frac{\partial}{\partial Z}\left(\Delta D_{\text{inter}_{s_m}}\frac{\partial}{\partial Z}C_{s_m}\right)-e_{\text{inter}_m}\frac{\Delta D_{\text{intra}_{s_m}}}{R}\frac{\partial}{\partial X}Q_{s_m}(t,X,Z)\bigg|_{X=1}\right)+$$
$$+\left(\psi_{s_m}(t,X,Z), \frac{\Delta D_{\text{intra}_{s_m}}}{R^2}\left(\frac{\partial^2}{\partial X^2}+\frac{2}{X}\frac{\partial}{\partial X}\right)Q_{s_m}(t,X,Z)\right). \quad (52)$$

Продифференцировав выражения (52) соответственно по $\Delta D_{\text{intra}\,s_m}$ и $\Delta D_{\text{inter}_{s_m}}$ и раскрыв скалярные произведения, получим искомые аналитические выражения градиентов функционала-невязки по необходимым компонентам коэффициентов компетитивной диффузии как функций от времени во внутрикристаллитном и межкристаллитном пространствах соответственно:

$$\nabla J_{D_{\text{intra}_{s_m}}}(t)=-\frac{e_{\text{inter}_m}}{R}\int_{L_{m-1}}^{L_m}\frac{\partial}{\partial X}Q_{s_m}(t,1,Z)\phi_{s_m}(t,Z)dZ+$$
$$+\frac{1}{R^2}\int_{L_{m-1}}^{L_m}\int_0^1\left(\frac{\partial^2}{\partial X^2}+\frac{2}{X}\frac{\partial}{\partial X}\right)Q_{s_m}(t,X,Z)\psi_{s_m}(t,X,Z)XdXdZ, \quad (53)$$

$$\nabla J_{D_{\text{inter}_{s_m}}}(t)=\int_{L_{m-1}}^{L_m}\frac{\partial^2 C_{s_m}(t,Z)}{\partial Z^2}\phi_{s_m}(t,Z)\,dZ. \quad (54)$$

Используя обобщенное решение сопряженной краевой задачи (42)–(46), выраженное формулами (37), получаем эквивалентные к (53), (54) выражения градиентов

$$\nabla J_{D_{\text{intra}\,s_m}}(t)=-\frac{e_{\text{inter}_m}}{R}\int_{L_{m-1}}^{L_m}\frac{\partial Q_{s_m}(t,1,Z)}{\partial X}\phi_{s_m}(t,Z)dZ-$$
$$-\frac{1}{R^2}\int_{L_{m-1}}^{L_m}\int_0^1\frac{\partial Q_{s_m}(t,X,Z)}{\partial X}\frac{\partial\psi_{s_m}(t,X,Z)}{\partial X}XdXdZ,$$
$$\nabla J_{D_{\text{inter}\,s_m}}(t)=-\int_{L_{m-1}}^{L_m}\frac{\partial C_{s_m}(t,Z)}{\partial Z}\frac{\partial\phi_{s_m}(t,Z)}{\partial Z}dZ.$$

Восстановленные профили коэффициентов диффузии. На рис. 2 представлены идентифицированные согласно формулам идентификации (9) по данным NMR-спектроскопии [6] распределения коэффициентов компетитивной диффузии бензола и гексана как функции от времени для пяти координационных позиций толщины 6, 8, 10, 12, 14 мм. Кривые коэффициентов диффузии D_{intra} (рис. 2, *а*) имеют псевдоэкспоненциальный характер и изменяются в диапазоне от $9.0 \cdot 10^{-13}$ до $1.0 \cdot 10^{-14}$ (для бензола) и от $9.0 \cdot 10^{-11}$ до $2.0 \cdot 10^{-12}$ (для гексана). Для времени диффузии больше 125–150 мин наблюдается относительно стабильная картина массопереноса, сопровождающаяся плавным приближением профилей коэффициентов диффузии D_{intra} к значениям, соответствующим положению их равновесия.

Функции распределения коэффициетов диффузии D_{inter} (рис. 2, *б*) для бензола имеют более пологий вид и изменяются в диапазоне от $6.0 \cdot 10^{-6}$ до $1.0 \cdot 10^{-6}$. Для времени диффузии больше 125–150 мин имеем незначительное изменение значений коэффициентов диффузии D_{inter}, для всех положений толщины слоя наблюдается их приближение к равновесию. Идентифицированные распределения коэффициентов компетитивной диффузии D_{inter} для гексана (см. рис. 2, *б*) как функций времени для тех же позиций координаты толщины 6, 8, 10, 12, 14 мм изменяются во времени в диапазоне от $2.7 \cdot 10^{-5}$ до $1.0 \cdot 10^{-5}$. Начиная с диффузионного времени 75–90 мин наблюдается процесс достижения равновесия.

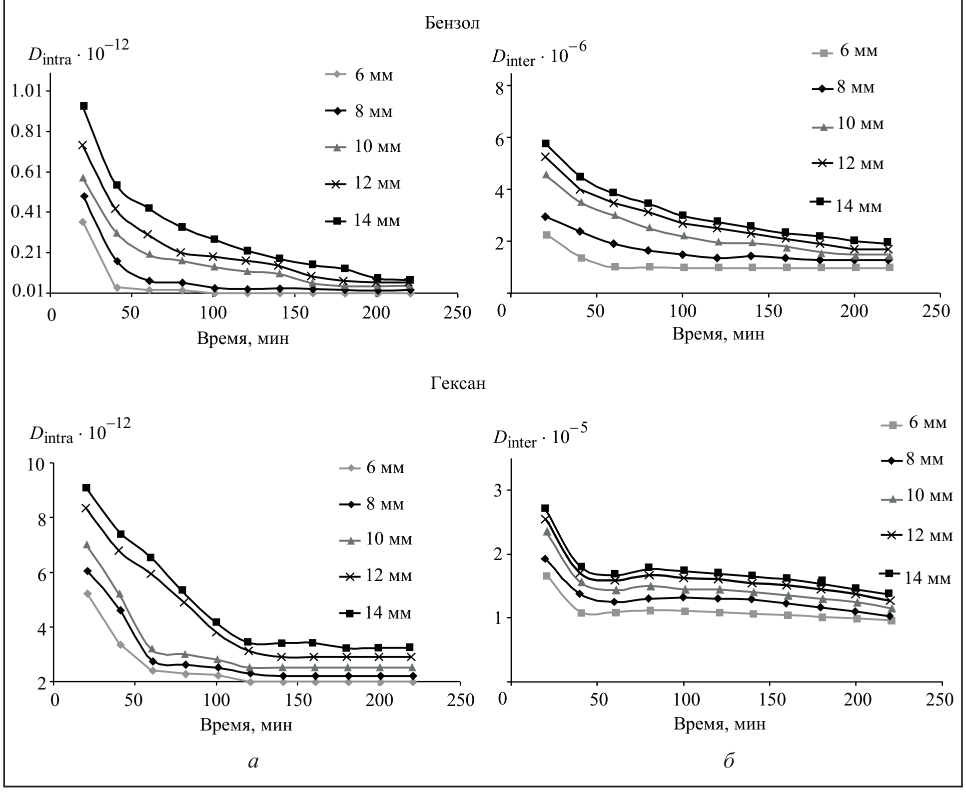

Рис. 2. Профили коэффициентов диффузии D_{intra} во внутрикристаллитном пространстве (*а*) и D_{inter} в межкристаллитном простанстве (*б*) в зависимости от времени и различных положений относительно толщины каталитического ложа

Концентрации и градиенты концентраций в микро- и нанопорах частиц. На рис. 3 графически представлены результаты моделирования кривых концентрации бензола и гексана в макропорах межкристаллитного пространства, построенных по результатам идентификации коэффициетов диффузии (см. рис. 2). Анализируя соответствующие кривые коэффициентов диффузии и распределения концентраций во времени и вдоль толщины слоя в межкристаллитном пространстве, можно заметить на одинаковых временных интервалах подобные характерные признаки достижения равновесия как относительно распределения коэффициентов диффузии, так и относительно концентраций.

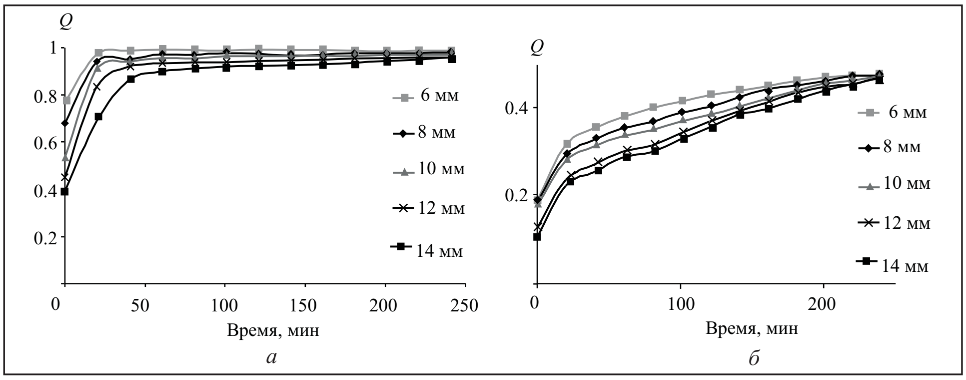

Рис. 3. Распределение градиентов концентраций диффузии (Q) в межкристаллитном пространстве в зависимости от времени и различных позиций каталитического слоя для бензола (*а*) и гексана (*б*)

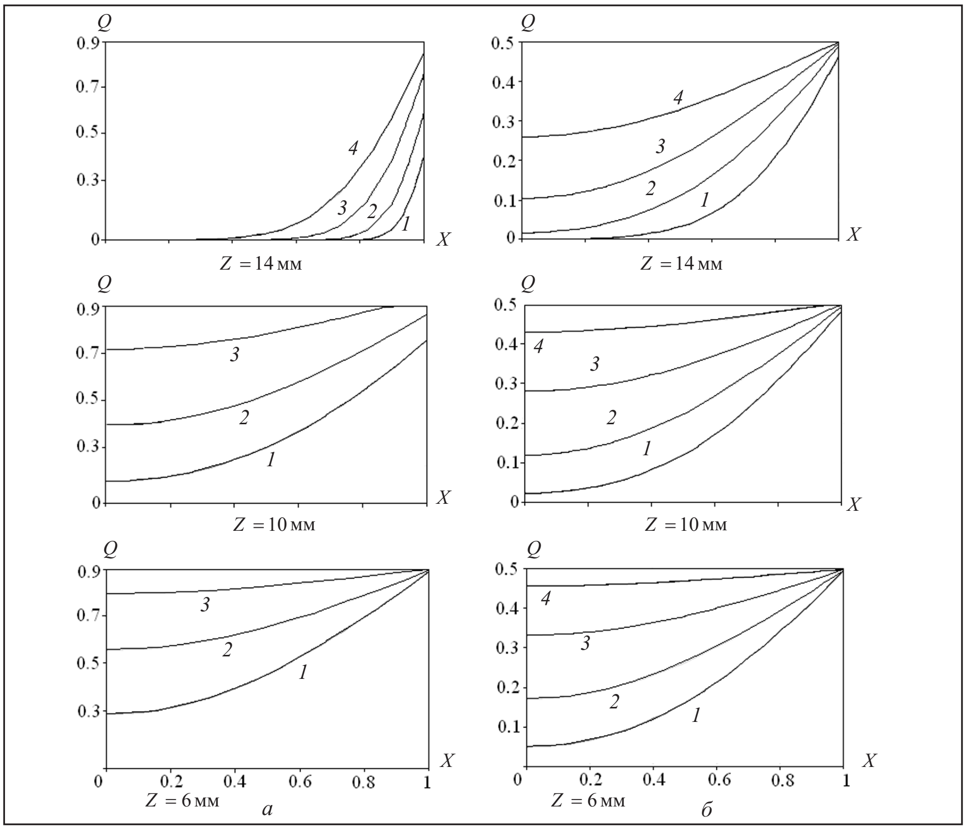

Рис. 4. Распределение градиентов концентраций диффузии (Q) вдоль радиуса частицы (X) во внутрикристаллитном пространстве при различных значениях времени для бензола (*а*) и гексана (*б*): $t = 25$ мин (*1*), $t = 50$ мин (*2*), $t = 100$ мин (*3*), $t = 200$ мин (*4*); 0 — центр частицы, 1 — поверхность частицы

Графики на рис. 4 демонстрируют изменение градиентов концентрации поглощенных компонентов адсорбата (бензола и гексана) в микро- и нанопорах внутрикристаллитного пространства вдоль радиуса частицы (кристаллита). На рис. 4, *а* показано изменение градиентов концентрации вдоль радиуса кристаллита для бензола во внутрикристаллитном пространстве для пяти координатных позиций толщины 6, 8, 10, 12 и 14 мм для следующих диффузионных периодов: 25, 50, 100, 200 мин. Как следует из графиков, значительные градиенты концентраций имеют место для частиц, размещенных в выходных слоях 6 мм и 8 мм, значения которых на финальной стадии диффузии достигают в центре кристаллитов 0.8 и 0.9 единиц. Для входных слоев наблюдается иная картина насыщения: 0.4–0.5 данных градиента концентрации.

На рис. 4, *б* показано изменение градиентов концентрации вдоль радиуса кристаллита для гексана во внутрикристаллитном пространстве для пяти координатных позиций толщины 6, 10, и 14 мм для тех же диффузионных периодов. Здесь наблюдается меньшая степень поглощения. Для частиц, размещенных в выходных слоях (6 мм), значения концентраций на финальной стадии диффузии достигают 0.3–0.1 единиц (в центре кристаллитов).

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей статье реализованы модели идентификации параметров компетитивной диффузии в неоднородных средах нанопористых частиц при обосновании постановок и разрешимости прямой и сопряженной краевых задач. Операционным методом Хевисайда получены их точные аналитические решения. Исходя из теории оптимального управления состоянием многокомпонентных систем и указанных высокоскоростных аналитических решений прямых и сопряженных задач получены явные градиенты функционалов-невязок для идентификации параметров нанопористых сред с наблюдениями за суммарными концентрациями сорбируемых смесей. Реализованы на этой основе высокопродуктивные градиентные процедуры идентификации коэффициентов диффузии в пространствах макро- и микропор частиц, обеспечивающие высокую степень распараллеливания вычислений и существенно сокращающие количество итераций на каждом регуляризационном цикле идентификации. Восстановлены зависимости коэффициентов диффузии в межкристаллитном и внутрикристаллитном пространствах, как функций от времени для различных положений частиц вдоль слоя катализатора, на основе которых построены распределения концентраций диффундируемых компонент в указанных пространствах.

Светлой памяти академика НАН Украины Василия Степановича Дейнеки посвящается настоящая статья.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Fernandez M., Kärger J., Freude D., Pampel D., Van Baten J.M., Krishna R. Mixture diffusion in zeolites studied by MAS PFG NMR and molecular simulation // Microporous and Mesoporous Materials. — 2007. — **105**. — P. 124–131.
2. Kärger J., Grinberg F., Heitjans P. Diffusion fundamentals. — Leipzig: Leipziger Universite, 2005. — 615 p.
3. Petryk M., Leclerc S., Canet D., Fraissard J. Modeling of gas transport in a microporous solid using a slice selection procedure: Application to the diffusion of benzene in ZSM5 // Catalysis Today. — 2008 — **139**, N 3. — P. 234–240.

4. L e c l e r c S., P e t r y k M., C a n e t D., F r a i s s a r d J. Competitive diffusion of gases in a zeolite using proton NMR and sclice selection procedure // Catalysis Today. — 2012. — **187**, N 1. — P. 104–107.

5. P e t r y k M., L e c l e r c S., C a n e t D., F r a i s s a r d J. Mathematical modeling and visualization of gas transport in a zeolite bed using a slice selection procedure // Diffusion Fundamentals. — 2007. — **4**. — P. 11.1–11.23.

6. Д е й н е к а В.С., П е т р и к М.Р., Ф р е с с а р д Ж. Идентификация кинетических параметров массопереноса в многокомпонентных системах компетитивной диффузии в неоднородных нанопористых средах // Кибернетика и системный анализ. — 2011. — № 5. — С. 46–64.

7. П е т р и к М.Р. Математическое моделирование массопереноса в симметрических неоднородных и нанопористых средах с системой n-интерфейсных взаимодействий // Кибернетика и системный анализ. — 2007. — № 1. — С. 114–134.

8. S e r g i e n k o I.V., D e i n e k a V.S. Optimal control of distributed systems with conjugation conditions. — New York: Kluwer Academic Publishers, 2005. — 400 p.

9. С т е п а н о в В.В. Курс дифференциальных уравнений. — М.: Физматгиз, 1959. — 468 с.

10. Л е н ю к М.П., П е т р и к М.Р. Інтегральні перетворення Фур'є, Бесселя із спектральним параметром в задачах математичного моделювання масопереносу в неоднорідних і нанопористих середовищах. — К.: Наук. думка, 2000. — 372 с.

11. Л а в р е н т ь е в М.А., Ш а б а т Б.В. Методы теории функций комплексного переменного. — М.: Наука, 1973. — 736 с.

12. Т и х о н о в А.Н., А р с е н и н В.Я. Методы решения некорректных задач. — М.: Наука, 1979. — 288 с.

13. L i o n s J.-L. Perturbations singulieres dans les problenus aux linutes et en controle optimal // Lecture Notes in Math. Ser. — New York: Springer, 2008. — 645 p.

14. А л и ф а н о в О.М. Обратные задачи теплообмена. — М.: Машиностроение, 1988. — 280 с.

15. Д е й н е к а В.С. Идентификация параметров задач массопереноса в нанопористых средах при известных суммарных распределениях массы // Доповіді НАН України. — 2013. — № 4. — С. 26–32.

16. Д е й н е к а В.С., П е т р и к М.Р., М и х а л и к Д.М. Идентификация кинетических параметров однокомпонентного адсорбционного массопереноса в микропористых каталитических средах // Проблемы управления и информатики. — 2011. — № 2. — С. 12–25.

17. П е т р и к М.Р., Ф р е с с а р д Ж. Математическое моделирование нелинейной компетитивной двухкомпонентной диффузии в среде нанопористых частиц // Проблемы управления и информатики. — 2009. — № 2. — С. 48–65.

18. С е р г и е н к о И.В., Д е й н е к а В.С. Идентификация градиентными методами параметров задач диффузии вещества в нанопористой среде // Проблемы управления и информатики. — 2010. — № 6. — С. 5–18.

19. С е р г и е н к о И.В., Д е й н е к а В.С. Системный анализ многокомпонентных распределенных систем. — Киев: Наук. думка, 2009. — 638 с.

Поступила 01.12.2014