УДК: 532.546: 519.6

ЗАДАЧА ИДЕНТИФИКАЦИИ КИНЕТИЧЕСКОГО КОЭФФИЦИЕНТА В УРАВНЕНИИ ДИФФУЗИИ–РЕАКЦИИ ПРИ НЕИЗВЕСТНОМ ГРАНИЧНОМ РЕЖИМЕ

Гусейнзаде С.О.

THE PROBLEM OF IDENTIFICATION OF KINETIC COEFFICIENT IN THE DIFFUSION- REACTION EQUATION AT THE UNKNOWN BOUNDARY MODE

Huseynzade S. O.

При неизвестном режиме на правой границе исследуемой области рассматривается обратная задача восстановления зависимости кинетического коэффициента реакции от времени нестационарного одномерного уравнения диффузии–реакции. Вместе с этим задаются дополнительное краевое условие на левой границе области, а также нелокальное краевое условие, которое содержит интеграл от искомого решения. Определенная задача преобразуется с использованием нелокального краевого условия путем интегрирования уравнения к коэффициентной обратной задаче с локальными условиями. Построен дискретный аналог краевой задачи с использованием явно-неявных схем для аппроксимации ее операторов. В качестве численного решения полученной разностной задачи предложен вычислительный алгоритм, основанный на сведении разностной задачи к двум линейным разностным задачам первого порядка. В результате получена явная формула для определения приближенного значения искомого коэффициента при каждом дискретном значении временной переменной. Проведены численные эксперименты для модельных задач с использованием предложенного вычислительного алгоритма.

Ключевые слова: *уравнение диффузии–реакции, коэффициентная обратная задача, нелокальное интегральное условие, разностная задача, явно-неявные схемы.*

Введение. Для исследования многих нестационарных процессов в гидродинамике, химической промышленности, биологии, экологии, теплопередаче, акустике и т.д. применяется следующее одномерное нестационарное уравнение диффузии–реакции [1–4]

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} + r(x,t)u(x,t) = \frac{\partial}{\partial x}(k(x,t)\frac{\partial u(x,t)}{\partial x}) + f(x,t), \quad 0<x<l,\ 0<t\le T \qquad (1)$$

где$u(x,t)$– физическая величина (масса, концентрация, импульс, энергия и т.д.), $r(x,t)$– кинетический коэффициент реакции, $k(x,t)$– коэффициент диффузии. Слагаемое $r(x,t)u(x,t)$ характеризует процесс поглощения или выделения физической величины, а слагаемое $f(x,t)$ характеризует действие внешнего источника.

Аналитические и численные исследования прямых начально-краевых задач для линейного уравнения диффузии–реакции рассмотрены в работах [1–4]. Необходимо отметить несомненный практический интерес поставленной задачи, ввиду важной физической значимости уравнения диффузии–реакции в различных областях при решении задач идентификации, связанных с восстановлением коэффициентов, внешнего источника, граничного режима и т.д.

В данной работе исследована коэффициентная обратная задача для уравнения (1), направленная на определение кинетического коэффициента реакции, представляя его функцией лишь от временной переменной, при отсутствии краевого условия на одной из границ рассматриваемой области. Общие методы решения обратных задач для уравнений математической физики исследованы авторами [5–7]. В работах [8, 9] исследованы некоторые коэффициентные обратные задачи для параболических уравнений в контексте их существования, единственности, разрешимости. Численные методы решения задач идентификации коэффициентов, входящих в уравнение диффузии–конвекции–реакции рассмотрены авторами [10–13].

Постановка задачи и метод решения. Рассмотрим одномерное нестационарное уравнение диффузии–реакции

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} + r(t)u(x,t) = \frac{\partial}{\partial x}(k(x,t)\frac{\partial u(x,t)}{\partial x}) + f(x,t), \quad 0<x<l,\ 0<t\le T. \qquad (2)$$

Для уравнения (2) известны следующие начальное и граничное условия

$$u(x,0)=\varphi(x),\quad 0\le x\le l, \tag{3}$$

$$k(x,t)\frac{\partial u(x,t)}{\partial x}\Big|_{x=0}=q(t),\quad 0\le t\le T. \tag{4}$$

Предположим, что граница рассматриваемой области $x=l$ не доступна для непосредственного измерения искомой физической величины и следовательно, точное представление условия на границе $x=l$ не представляется возможным. Кроме того, также не известен кинетический коэффициент реакции $r(t)$. Очевидно, что, для корректной постановки задачи, необходимо задавать дополнительные условия. Представим дополнительные условия в следующем виде

$$u(0,t)=c(t),\quad 0\le t\le T, \tag{5}$$

$$\int_0^l u(x,t)dx=e(t),\quad 0\le t\le T. \tag{6}$$

Предполагается, что при этом выполняются условия согласования

$$c(0)=\varphi(0),\qquad \int_0^l \varphi(x)dx=e(0)\cdot$$

Таким образом, задача заключается в определении функций $u(x,t)$, $r(t)$, удовлетворяющих уравнению (2) и условиям (3)– (6).

Необходимо отметить, что в данной задаче дополнительное условие (6) не является локальным условием для уравнения (2).

Сначала задачу (2)–(6) сведем к задаче с локальными условиями. Проведем дифференцирование соотношения (6) по переменной t

$$\int_0^l \frac{\partial u(x,t)}{\partial t}dx=\frac{de(t)}{dt}.$$

Подставим в это соотношение выражения для $\dfrac{\partial u(x,t)}{\partial t}$ из уравнения (2)

$$\int_0^l\left[-r(t)u(x,t)+\frac{\partial}{\partial x}\Big(k(x,t)\frac{\partial u(x,t)}{\partial x}\Big)+f(x,t)\right]dx=\frac{de(t)}{dt}$$

.

Выполнив интегрирования по частям и учитывая условия (4), (6) получим

$$-r(t)e(t)+k(x,t)\frac{\partial u(x,t)}{\partial x}\Big|_{x=l}-q(t)+g(t)=\frac{de(t)}{dt},$$

где $g(t)=\int_0^l f(x,t)dx$.

Разрешив последнее уравнение относительно $k(x,t)\dfrac{\partial u(x,t)}{\partial x}\Big|_{x=l}$, получим недостающее краевое условие для уравнения (2) на границе $x=l$

$$k(x,t)\frac{\partial u(x,t)}{\partial x}\Big|_{x=l}=\frac{\partial e(t)}{\partial t}+r(t)e(t)+q(t)-g(t)\,. \tag{7}$$

Теперь задача заключается в определении функций $u(x,t)$, $r(t)$, которые удовлетворяют уравнению (2), начальному условию (3) и локальным граничным условиям (4), (5), (7). Данная задача относится к классу граничных обратных задач [5–7]. Построим дискретный аналог дифференциальной задачи (2)–(5), (7). С этой целью введем равномерную разностную сетку

$$\bar{\omega}=\{(t_j,x_i):x_i=i\Delta x,\ t_j=j\Delta t,\ i=0,1,2,...n,\ j=0,1,2,...m\}$$

в прямоугольной области $\{0\le x\le l,\ 0\le t\le T\}$ с шагами $\Delta x=l/n$ по переменной x и $\Delta t=T/m$ по времени t. Используя явную аппроксимацию по времени для оператора реакции, а неявную аппроксимацию для оператора диффузии, дискретный аналог задачи (2)–(5), (7) на сетке $\bar{\omega}$ представим следующим образом

$$\frac{u_i^j-u_i^{j-1}}{\Delta t}+r^j u_i^{j-1}=\frac{1}{\Delta x}\left[k_{i+1/2}^j\frac{u_{i+1}^j-u_i^j}{\Delta x}-k_{i-1/2}^j\frac{u_i^j-u_{i-1}^j}{\Delta x}\right]+f_i^j,$$

$$i=1,2,\dots n-1,$$

$$k_0^j\frac{u_1^j-u_0^j}{\Delta x}=q^j,$$

$$k_n^j\frac{u_n^j-u_{n-1}^j}{\Delta x}=\frac{e^j-e^{j-1}}{\Delta t}+r^je^j+q^j-g^j,$$

$$u_0^j=c^j,$$

$$j=1,2,\dots,m,$$

$$u_i^0=\varphi(x_i),\qquad i=0,2,\dots n,$$

где

$$u_i^j\approx u^j(x_i,t_j),\ r^j\approx r(t_j),\ f_i^j=f(x_i,t_j),\ k_{i\pm1/2}^j=k(x_i\pm\Delta x/2),$$

$$q^j=q(t_j),\quad e^j=e(t_j),\quad g^j=g(t_j),\quad c^j=c(t_j).$$

Преобразуем полученную систему разностных уравнений к виду

$$a_iu_{i-1}^j-d_iu_i^j+b_iu_{i+1}^j=-u_i^{j-1}\Delta x^2-f_i^j\Delta x^2\Delta t+r^ju_i^{j-1}\Delta x^2\Delta t \tag{8}$$

$$i=1,2,...,n-1,$$

$$u_1^j = u_0^j + q^j \Delta x / k_0^j, \tag{9}$$

$$\boldsymbol{u_0^j = c^j}, \tag{10}$$

$$u_n^j = u_{n-1}^j + \Delta x(q^j - g^j + (e^j - e^{j-1})/\Delta t)/k_n^j + r^j e^j \Delta x / k_n^j, \tag{11}$$

$$j = 1, 2, 3, ..., m, \; u_i^0 = \varphi_i, \tag{12}$$

где $a_i = \Delta t\, k_{i-1/2}^j, b_i = \Delta t k_{i+1/2}^j,\; d_i = a_i + b_i + \Delta x^2$.

Разностная задача (8)–(12) представляет собой систему линейных алгебраических уравнений, в которой в качестве неизвестных выступают приближенные значения искомых функций $u(x,t)$ и $r(t)$ в узлах разностной сетки $\overline{\omega}$, т.е. $u_i^j,\, r^j$, $i = 0, 1, 2, ..., n$, $j = 1, 2, 3, ..., m$.

Предположим, что решение системы уравнений (8)–(12) при каждом фиксированном значении j, $j = 1, 2, \ldots, m$ можно представить в виде

$$u_i^j = \alpha_i u_{i-1}^j + \beta_i, \qquad i = 1, 2, ..., n, \tag{13}$$

где α_i, β_i – неизвестные пока коэффициенты. Запишем аналогичное выражение для u_{i+1}^j

$$u_{i+1}^j = \alpha_{i+1} u_i^j + \beta_{i+1}.$$

Подставляя выражение для u_{i+1}^j в уравнение (8), получим следующие нелинейные уравнения для определения коэффициентов α_i, β_i

$$\alpha_i = \frac{a_i}{d_i - b_i \alpha_{i+1}}, \tag{14}$$

$$\beta_i = \frac{b_i}{d_i - b_i\alpha_{i+1}}\beta_{i+1} + \frac{u_i^{j-1}\Delta x^2 + f_i^j \Delta x^2 \Delta t}{d_i - b_i\alpha_{i+1}} - \frac{u_i^{j-1}\Delta x^2 \Delta t}{d_i - b_i\alpha_{i+1}} r^j, \tag{15}$$

$$i = n-1, n-2, ..., 1.$$

Уравнения (14), (15) представляют собой нелинейные разностные уравнения первого порядка. Необходимо задавать начальные значения коэффициентов α_i, β_i для решения этих уравнений. Эти значения определим из требования эквивалентности представления (13) при $i = n$, т.е. $u_n^j = \alpha_n u_{n-1}^j + \beta_n$, условию (11)

$$\alpha_n = 1,$$

$$\beta_n = \Delta x(q^j - g^j + (e^j - e^{j-1})/\Delta t)/k_n^j + r^j e^j \Delta x / k_n^j. \tag{16}$$

Таким образом, определив α_n, остальные значения коэффициентов α_i, $i = n-1, n-2, ..., 1$ последовательно можно найти по формуле (14).

С целью разделения переменных в нелинейном уравнении для β_i, представим его в виде [14]

$$\beta_i = \xi_i + \eta_i r^j, \qquad i = n-1, n-2, ..., 1, \tag{17}$$

где ξ_i, η_i – неизвестные переменные.

Подставив соотношение (17) в уравнение (15), будем иметь

$$\xi_i + \eta_i r^j = \frac{b_i}{d_i - b_i\alpha_{i+1}}\xi_{i+1} + \frac{b_i}{d_i - b_i\alpha_{i+1}}\eta_{i+1} r^j + \frac{u_i^{j-1}\Delta x^2 + f_i^j \Delta x^2 \Delta t}{d_i - b_i\alpha_{i+1}} - \frac{u_i^{j-1}\Delta x^2 \Delta t}{d_i - b_i\alpha_{i+1}} r^j$$

или

$$\left[\xi_i - \frac{b_i}{d_i - b_i\alpha_{i+1}}\xi_{i+1} - \frac{u_i^{j-1}\Delta x^2 + f_i^j \Delta x^2 \Delta t}{d_i - b_i\alpha_{i+1}}\right] + r^j\left[\eta_i - \frac{b_i}{d_i - b_i\alpha_{i+1}}\eta_{i+1} + \frac{u_i^{j-1}\Delta x^2 \Delta t}{d_i - b_i\alpha_{i+1}}\right] = 0.$$

Соотношение (17) также подставим в (16)

$$\xi_n + \eta_n r^j = \Delta x(q^j - g^j + (e^j - e^{j-1})/\Delta t)/k_n^j + r^j e^j \Delta x / k_n^j.$$

Из последних соотношений получим следующие разностные задачи для определения вспомогательных переменных ξ_i, η_i

$$\xi_i - \frac{b_i}{d_i - b_i\alpha_{i+1}}\xi_{i+1} - \frac{u_i^{j-1}\Delta x^2 + f_i^j \Delta x^2 \Delta t}{d_i - b_i\alpha_{i+1}} = 0, \quad i = n-1, n-2, ..., 1, \tag{18}$$

$$\xi_n = \Delta x(q^j - g^j + (e^j - e^{j-1})/\Delta t)/k_n^j. \tag{19}$$

$$\eta_i - \frac{b_i}{d_i - b_i\alpha_{i+1}}\eta_{i+1} + \frac{u_i^{j-1}\Delta x^2 \Delta t}{d_i - b_i\alpha_{i+1}} = 0, \quad i = n-1, n-2, ..., 1, \tag{20}$$

$$\eta_n = e^j \Delta x / k_n^j \tag{21}$$

Разностные задачи (18), (19) и (20), (21) представляют собой линейные разностные задачи первого порядка. Решения этих задач можно записать в явном виде. С этой целью уравнение (18) запишем в виде

$$\xi_i = s_i \xi_{i+1} + y_i$$

где $s_i = \dfrac{b_i}{d_i - b_i\alpha_{i+1}}$, $\quad y_i = \dfrac{u_i^{j-1}\Delta x^2 + f_i^j \Delta x^2 \Delta t}{d_i - b_i\alpha_{i+1}}$.

Подставив сюда выражение для ξ_{i+1}

$$\xi_{i+1} = s_{i+1}\xi_{i+2} + y_{i+1},$$

будем иметь

$$\xi_i = s_i s_{i+1}\xi_{i+2} + s_i y_{i+1} + y_i .$$

Далее, подставляя в последнее уравнение выражения для $\xi_{i+2}, \xi_{i+3},\dots,\xi_{n-1}$, получим

$$\xi_i = \xi_n \prod_{k=i}^{n-1} s_k + \sum_{\substack{k=i+1 \\ k\le n-1}}^{n-1} y_k \prod_{v=i}^{k-1} s_v + y_i ,$$

$$i = n-1,\, n-2,\, \dots,1 .$$

Аналогично определяется решение разностной задачи (20), (21)

$$\eta_i = \eta_n \prod_{k=i}^{n-1} s_k + \sum_{\substack{k=i+1 \\ k\le n-1}}^{n-1} \theta_k \prod_{v=i}^{k-1} s_v + \theta_i ,$$

$$i = n-1,\, n-2,\, \dots,1 .$$

где $\theta_i = -\dfrac{u_i^{j-1}\Delta x^2 \Delta t}{d_i - b_i\alpha_{i+1}}$.

Учитывая представление (17) для коэффициентов β_i, решение системы уравнений (8)–(12) при каждом фиксированном значении j, $j = 1, 2, \dots, m$ можно представить в виде рекуррентного соотношения

$$u_i^j = \alpha_i u_{i-1}^j + \xi_i + \eta_i r^j , \qquad i = 1, 2,\dots,n . \quad (22)$$

В последнем соотношении принимая $i = 1$

$$u_1^j = \alpha_1 u_0^j + \xi_1 + \eta_1 r^j$$

и учитывая условия (9), (10), будем иметь

$$c^j + q^j \Delta x / k_0^j = \alpha_1 c^j + \xi_1 + \eta_1 r^j .$$

Отсюда можно определить приближенное значение искомой функции $r(t)$ при $t = t_j$, т.е. r^j

$$r^j = \frac{c^j(1-\alpha_1) + q^j \Delta x / k_0^j - \xi_1}{\eta_1} . \qquad (23)$$

Таким образом, вычислительный алгоритм решения разностной задачи (8)–(12) по определению u_i^j, $i = \overline{1,n}$ и r^j при каждом фиксированном значении $j = 1, 2, \dots, m$, основан на решении двух линейных разностных задач первого порядка (18), (19) и (20), (21) относительно вспомогательных переменных ξ_i, η_i, $i = \overline{1,n}$, определения r^j из (23) и использовании представления (22) для вычисления u_i^j, $i = \overline{1,n}$.

Результаты численных расчетов. Проведены численные эксперименты для модельных задач на основе предложенных вычислительных алгоритмов. Далее приведены результаты численного эксперимента для следующей модельной задачи.

Задача. Необходимо найти функции $u(x,t)$ и $r(t)$, которые удовлетворяют следующие условия

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} + r(t)u(x,t) = \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{(x+1)^2}{12(t+1)}\frac{\partial u(x,t)}{\partial x}\right) + 10(x+1)^2 t ,$$

$$0 < x < 1, \quad t > 0,$$

$$u(x,0) = 2(x+1)^2 ,$$

$$u(0,t) = 2\sqrt{t+1} ,$$

$$\frac{(x+1)^2}{12(t+1)}\frac{\partial u(x,t)}{\partial x}\Big|_{x=0} = \frac{1}{3\sqrt{t+1}} ,$$

$$\int_0^1 u(x,t)dx = \frac{14\sqrt{t+1}}{3} .$$

Точным решением данной задачи являются функции

$$u(x,t) = 2(x+1)^2\sqrt{t+1} , \qquad r(t) = \frac{5t}{\sqrt{t+1}} .$$

Численные расчеты проводились в двух вариантах. Первая серия расчетов выполнялась с использованием невозмущенных входных данных. В таблице 1 представлены результаты численного решения задачи при использовании невозмущенных данных: в ней t – время, r^t – точные значения функции $r(t)$, $\overline{r}$ – вычисленные значения $r(t)$ при невозмущенных данных. Результаты численного эксперимента показали, что искомая функция $r(t)$ восстанавливается с достаточно высокой точностью при всех расчетных сетках по времени. При этом максимальная относительная погрешность восстановления искомого коэффициента не превышает 0.2 %.

Вторая серия расчетов проводились при наложении на $c(t) = u(0,t)$ некоторой функции, моделирующей погрешность входных данных

$$\tilde{c}(t) = c(t) + \delta c(t)\sigma(t),$$

где $\sigma(t)$ – случайный процесс, моделируемый с помощью датчика случайных чисел, δ – уровень погрешности. Уровень погрешности определен как δ =0.01 и δ =0.05. Результаты численных расчетов при использовании возмущенных входных данных представлены в таблице 2: в ней $\tilde{r}$ вычисленные значения $r(t)$ при возмущенных данных.

Таблица 1

Численные результаты при невозмущенных входных данных

t,сек.	r^t	$\bar{r}$		
		Δt =0.001	Δt =0.005	Δt =0.01
0.5	2.041	2.042	2.045	2.048
1.0	3.536	3.537	3.541	3.545
1.5	4.743	4.744	4.749	4.754
2.0	5.774	5.775	5.779	5.784
2.5	6.682	6.683	6.687	6.692
3.0	7.500	7.502	7.505	7.510
3.5	8.250	8.251	8.255	8.259
4.0	8.944	8.946	8.949	8.954
4.5	9.594	9.595	9.599	9.603
5.0	10.206	10.208	10.210	10.214

Таблица 2

Численные результаты при возмущенных входных данных

t	r^t	$\tilde{r}$, δ =0.01		$\tilde{r}$, δ =0.05	
		Δt = 0.005	Δt = 0.05	Δt = 0.01	Δt = 0.05
1	3.536	4.253	3.645	2.882	3.866
2	5.774	6.007	5.934	7.333	6.337
3	7.500	6.655	7.580	8.122	7.675
4	8.944	8.372	8.899	9.262	8.516
5	10.206	10.180	10.177	7.413	9.864
6	11.339	11.846	11.357	9.137	11.233
7	12.374	13.951	12.351	12.784	12.071
8	13.333	13.475	13.287	11.672	12.926
9	14.230	13.768	14.210	12.384	13.954
10	15.076	15.831	15.062	14.780	14.840

Результаты численных расчетов показали, что при использовании возмущенных входных данных, погрешность имеет флуктуационный характер и искомая функция $r(t)$ восстанавливается с определенной погрешностью. На уровне погрешности δ =0.01 при Δt =0.005 максимальная относительная погрешность восстановления искомого коэффициента превышает 19% , а при Δt=0.05 максимальная относительная погрешность не превышает 3%. А на уровне погрешности δ =0.05 при Δt =0.01 максимальная относительная погрешность восстановления искомого коэффициента превышает 37% , а при Δt =0.05 –не превышает 5%. Анализ результатов численного экспериментирования свидетельствует, что для случая возмущенных входных данных использование малых шагов по времени дает противоположный эффект по сравнению с численным решением прямых краевых задач. Следовательно, увеличивая величины шага разностной сетки по времени можно обеспечить устойчивость решения обратной задачи.

Л и т е р а т у р а

1. Андерсон Д., Таннехил Дж., Плетчер Р. Вычислительная гидромеханика и теплообмен. М.: Мир, 1990.Том 1. 384 с.
2. Уизем Дж. Б. Линейные и нелинейные волны. М.: Мир,1977. 638 с.
3. Пасконов В.М., Полежаев В.И., Чудов Л.А. Численное моделирование процессов тепло-и массообмена. М.: Наука, 1984. 288 с.
4. Роуч П. Вычислительная гидродинамика. М.: Мир,1980. 528 с.
5. Алифанов О.М., Артюхин Е.А., Румянцев С.В. Экстремальные методы решения некорректных задач. М.: Наука, 1988. 288 с.
6. Самарский А.А., Вабищевич П.Н. Численные методы решения обратных задач математической физики. М.: Издательство ЛКИ, 2009. 480 с.
7. Кабанихин С. И. Обратные и некорректные задачи. Новосибирск: Сибирское научное издательство, 2009. 457 с.
8. Камынин В. Л. Обратная задача определения младшего коэффициента в параболическом уравнении при условии интегрального наблюдения. Матем. заметки, 2013, том 94, выпуск 2, с. 207–2175.
9. Кожанов А. И. Параболические уравнения с неизвестными коэффициентами, зависящими от времени .Ж. вычисл. матем. и матем. физ., 2017, том 57, номер 6, с. 961–972.
10. Vabishchevich P.N., Vasil'ev V.I. Computational algorithms for solving the coefficient inverse problem for parabolic equations // Inverse Problems in Science and Engineering. 2016. V. 24. P. 42–59.
11. Вабищевич П. Н., Клибанов М. В. Вычислительная идентификация старшего коэффициента параболического уравнения// Дифференциальные уравнения, 2016, том 52, № 7, с. 896–903.
12. Nazim B. Kerimov , Mansur I. Ismailov . An inverse coefficient problem for the heat equation in the case of nonlocal boundary conditions. Journal of Mathematical Analysis and Applications,Volume 396, Issue 2, 2012, P. 546-554.
13. Гамзаев Х.М. Численный метод решения коэффициентной обратной задачи для уравнения диффузии – конвекции – реакции. Вестник Томского государственного университета, Математика и Механика, 2017, №50, с.67–78.
14. Gamzaev Kh.M. Numerical Solution of Combined Inverse Problem for Generalized Burgers Equation. Journal of Mathematical Sciences, Volume 221, Number 6 ,March 28, 2017. p. 833-839.

R e f e r e n c e s

1. Anderson D., Tannehill K., Pletcher R. Computational fluid mechanics and heat transfer.Vol 1. New York, 1984. 392 p.
2. Whitham G.B. Linear and Nonlinear Waves. John Wiley & Sons Inc., 1974. 629 p.
3. Paskonov V.M., Polejaev V.I., Chudov L.A. Chislennoe modelirovanie prosessov teplo-i-massoobmena[Numerical modeling of heat and mass transfer processes]. Moscow, Nauka, 1984. 288 p.
4. Roache P.J. Computational fluid dynamics. Albuquerque, Hermosa Publishers, 1976. 446 p.
5. Alifanov O.M., Artyukhin E.A., Rumyantsev S.V. Ekstremalniye metodi resheniya nekorrektnich zadach[Extreme methods for solving ill-posed problems]. Moscow.: Nauka, 1988. 288 p.
6. Samarsky A.A., Vabishchevich P.N. Chislennie metodi resheniya obratnich zadach matematicheskoy fiziki [Numerical methods for solving inverse problems of mathematical physics]. Moscow, Publishing house LCI, 2009.480 p.

7. Kabanikhin S. I. Obratniye I nekorrektiye zadachi [Inverse and Ill-Posed Problems] Siberian Scientific publishers, Novosibirsk, 2009 , 457 p.
8. Kamynin V. L. The Inverse Problem of Determining the Lower-Order Coefficient in Parabolic Equations with Integral Observation // Mathematical Notes, 2013, 94:2, p. 205–213.
9. Kozhanov A. I. Parabolic equations with unknown time-dependent coefficients .Computational Mathematics and Mathematical Physics, 2017, 57:6, p. 956–966 .
10. Vabishchevich P.N., Vasil'ev V.I. Computational algorithms for solving the coefficient inverse problem for parabolic equations // Inverse Problems in Science and Engineering. 2016. V. 24. P. 42–59.
11. Vabishchevich P.N., Klibanov M. V. Numerical identification of the leading coefficient of a parabolic equation//Differential Equations. 2016, Vol. 52, Issue 7, pp 855–862.
12. Nazim B. Kerimov , Mansur I. Ismailov . An inverse coefficient problem for the heat equation in the case of nonlocal boundary conditions. Journal of Mathematical Analysis and Applications,Volume 396, Issue 2, 2012, Pages 546-554.
13. Gamzaev Kh.M. (2017) A numerical method for solving the coefficient inverse problem for diffusion-convection-reaction equation. Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. matematika i mekhanika [Tomsk state universityJournal of Mathematics and Mechanics]. 50. pp. 67−78.
14. Gamzaev Kh.M. Numerical Solution of Combined Inverse Problem for Generalized Burgers Equation. Journal of Mathematical Sciences, Volume 221, Number 6 ,March 28, 2017. p. 833-839.

Гусейнзаде С.О. Задача ідентифікації кінетичного коефіцієнту в рівнянні дифузії-реакції при невідомому граничному режимі

Розглядається зворотна задача по відновленню залежності кінетичного коефіцієнту реакції від часу нестаціонарного одновимірного рівняння дифузії-реакції при невідомому режимі на правій межі даної області. При цьому задаються нелокальна крайова умова, що містить інтеграл від шуканого рішення, а також додаткова крайова умова на лівій межі області. Поставлена задача шляхом інтегрування рівняння з використанням нелокальної крайової умови перетворюється до коефіцієнтної зворотньої задачі з локальними умовами. Використовуючи явно-неявні схеми для апроксимації операторів крайової задачі, побудований її дискретний аналог. Для чисельного рішення отриманої різнисної задачі пропонується обчислювальний алгоритм, заснований на зведенні різнисної задачі до двох лінійним різницевим завданням першого порядку. В результаті отримана явна формула для визначення наближеного значення шуканого коефіцієнта при кожному дискретному значенні тимчасової змінної. На основі запропонованого обчислювального алгоритму були проведені чисельні експерименти для модельних задач.

Ключові слова: *рівняння дифузії-реакції, коефіцієнтна зворотна задача, нелокальна інтегральна умова, різницева задача, явно-неявні схеми.*

Huseynzade S.O. The problem of identification of kinetic coefficient in the diffusion-reaction equation at the unknown boundary mode

We consider the inverse problem of restoring the dependence of the kinetic response coefficient on the time of the nonstationary one-dimensional diffusion-reaction equation under the unknown regime on the right boundary of the region under consideration. In this case, a non-local boundary condition is established that contains the integral of the desired solution, and also an additional boundary condition on the left boundary of the domain. The problem is solved by integrating the equation with the use of a nonlocal boundary condition, which is transformed to a coefficient inverse problem with local conditions. Using explicitly implicit schemes for approximating the operators of the boundary value problem, a discrete analogue is constructed. For numerical solution of the obtained difference problem, a computational algorithm based on reduction of the difference problem to two linear difference problems of the first order is proposed. As a result, an explicit formula is obtained to determine the approximate value of the sought-for coefficient for each discrete value of the time variable. Based on the proposed computational algorithm, numerical experiments were performed for model problems.

Keywords: *diffusion reaction equation, coefficient inverse problem, nonlocal integral condition, difference problem, explicit-implicit schemes.*

Гусейнзаде С. О. – доцент кафедры общей и прикладной математики Азербайджанского государственного университет нефти и промышленности, e-mail: sevilhuseynzade@gmail.com

Рецензент: д.е.н., проф. ***Д'яченко Ю.Ю.***

Стаття подана 16.11.2018