
Об одной обратной задаче параметрической идентификации

Чернов И. А.

*Институт прикладных математических исследований Карельского
научного центра РАН, Пушкинская 11, Петрозаводск, 185910, Россия
e-mail: IACHernov@yandex.ru*

Металлогидридные аккумуляторы водорода являются одним из возможных решений проблемы хранения экологически чистого водородного топлива [1]. На первый план выходит кинетика: скорости поглощения и выделения водорода должны быть достаточно высоки. Поэтому актуальна математическая задача оценки констант скоростей элементарных процессов (коэффициентов) по измеряемым данным. Такие задачи относятся к классу обратных и представляют также чисто математический интерес.

Рассматриваем задачу Коши для системы ОДУ — модель распада гидрида. Материал — сферическая частица единичного радиуса, в центре гидридное ядро радиуса $\rho(t)$, покрытое коркой металла с растворенным водородом. Концентрации содержащегося в гидриде и растворенного в фазе металла водорода обозначены $Q > 1$ и $c(t)$. Равновесную по отношению к гидриду концентрацию принимаем за единицу. Уравнения выводятся из закона сохранения [2] и имеют вид

$$\begin{aligned}(1 - \rho^3)\dot{c} &= -3b(t)c^2 + 3k(t)(1 - c)\rho^2, & c(0) &= c_0 \in [0, 1] \leq 1, \\ (Q - c)\dot{\rho} &= -k(t)(1 - c) \quad \text{при } \rho > 0, & \rho(0) &= \rho_0 \in (0, 1), \\ \dot{\rho} &= 0 \quad \text{при } \rho = 0, & t^* &= \min\{t : \rho(t) = 0\}.\end{aligned}$$

Здесь $b(t)$, $k(t)$ — константы скоростей элементарных процессов (десорбция и распад гидрида); зависимость от времени связана с нагревом. Время t^* — окончания распада гидрида — также неизвестно. Требуется определить $b(t)$, $k(t)$ и t^* по измерениям на $[0, T]$ десорбционного потока $f(t)$. Для этого ищем минимум среднеквадратичной невязки

$$\|bc^2 - f(t)\|_{L_2([0, T])}^2 \rightarrow \min.$$

На искомые функции $b(t)$ и $k(t)$ не накладываем никаких ограничений (помимо гладкости); рассчитываем, что оптимальные параметры будут иметь нужный вид (или близки к нему). По крайней мере, точное решение прямой задачи для заданных $b(t)$ и $k(t)$ должно позволять «восстановить» их.

Задача сводится к классической задаче вариационного исчисления со свободным концом для двух неизвестных функций $c(t)$ и $\rho(t)$. Оказалось, что уравнения Эйлера зависимы (и это следствие консервативности системы), так что требуется дополнительная информация. В частности, задание $k(t)$

позволяет получить $b(t)$, решив задачу Коши для ОДУ первого порядка. Существенно, что измерения в это уравнение входят под знаком интеграла, что обеспечивает некоторую устойчивость к погрешностям измерений.

Выбор $k(t)$ можно использовать для дополнительной оптимизации; одним из вариантов является обеспечение максимальной среднеквадратичной близости $b(t)$ к параметрическому семейству кривых (например, аррениусовых или линейных зависимостей от температуры при заданном законе нагрева).

Литература

1. Вербецкий В. Н. Митрохин С. В. *Гидриды интерметаллических соединений — синтез, свойства и применение для аккумулярования водорода*, Международный научный журнал «Альтернативная энергетика и экология», **10(30)** (2005), 41–61.
2. Заика Ю. В., Родченкова Н. И. *Моделирование высокотемпературного пика ТДС-спектра дегидрирования*, Математическое моделирование, **18**, No. 4 (2006), 100–112.