

Харківський національний університет радіоелектроніки

Факультет інформаційно-аналітичних технологій та менеджменту

Кафедра прикладної математики

Рівень вищої освіти другий (магістерський)

Спеціальність 113 Прикладна математика

(код і повна назва)

Тип програми освітньо-професійна

(освітньо-професійна або освітньо-наукова)

Освітня програма Прикладна математика

(повна назва)

ЗАТВЕРДЖУЮ:

Зав. кафедри ПМ _____

(підпис)

“ _____ ” _____ 2021 р.

ЗАВДАННЯ
НА КВАЛІФІКАЦІЙНУ РОБОТУ

студентові Вовченку Платону Андрійовичу

(прізвище, ім'я, по батькові)

1. Тема роботи Дослідження методом двобічних наближень термохімічних процесів, що описуються нелінійними еліптичними крайовими задачами

затверджена наказом по університету від 05 листопада 2021 р. № 1641 Ст

2. Термін подання студентом роботи до екзаменаційної комісії 10 грудня 2021 р.

3. Вихідні дані до роботи математична модель термохімічної реакції

4. Перелік питань, що потрібно опрацювати в роботі _____

1. Аналіз предметної області

2. Вибір і обґрунтування методу розв'язання

3. Програмна реалізація

4. Результати обчислювального експерименту

5. Аналіз можливих застосувань

5. Перелік графічного матеріалу із зазначенням креслеників, схем, плакатів, комп'ютерних ілюстрацій _____

1. Актуальність теми роботи _____

2. Постановка задачі _____

3. Аналіз предметної області _____

4. Метод чисельного аналізу _____

5. Результати обчислювального експерименту _____

КАЛЕНДАРНИЙ ПЛАН

№	Назва етапів роботи	Терміни виконання етапів роботи	Примітка
1	Підбір та вивчення технічної літератури за темою роботи	8 – 14 листопада 2021 р.	виконано
2	Вибір та обґрунтування методу	15 – 21 листопада 2021 р.	виконано
3	Розробка алгоритму і програми	22 – 28 листопада 2021 р.	виконано
4	Проведення аналітичних досліджень та розрахунків	29 листопада – 5 грудня 2021 р.	виконано
5	Робота над текстом пояснювальної записки	6 – 9 грудня 2021 р.	виконано
6	Представлення роботи на рецензію в ЕК	10 грудня 2021 р.	виконано

Дата видачі завдання 8 листопада 2021 р.

Студент _____
(підпис)

Керівник роботи _____ проф. Сидоров М.В.
(підпис) (посада, прізвище, ініціали)

РЕФЕРАТ

Пояснювальна записка: 64 с., 6 табл., 10 рис., 1 дод., 30 джерел.

ГЕТЕРОТОННИЙ ОПЕРАТОР, ЗАКОН АРРЕНІУСА, МЕТОД ДВОБІЧНИХ НАБЛИЖЕНЬ, РІВНЯННЯ ГАММЕРШТЕЙНА, СИЛЬНО ІНВАРІАНТНИЙ КОНУСНИЙ ВІДРІЗОК, ТЕРМОХІМІЧНИЙ ПРОЦЕС, ФУНКЦІЯ ГРІНА.

Об'єкт дослідження – термохімічні процеси.

Мета роботи – дослідження методом двобічних наближень на основі використання функції Гріна термохімічних процесів, що описуються нелінійними еліптичними крайовими задачами.

Методи дослідження – методи теорії нелінійних операторних рівнянь у напівупорядкованих банахових просторах і методи математичної фізики для теоретичного дослідження розглядуваної нелінійної еліптичної крайової задачі та двобічного ітераційного методу її розв'язання.

Кваліфікаційна робота присвячена дослідженню методом двобічних наближень на основі використання функції Гріна нелінійної еліптичної крайової задачі, яка є математичною моделлю термохімічного процесу. Побудова двобічних наближень заснована на переході за допомогою метода функції Гріна до еквівалентного інтегрального рівняння Гаммерштейна, яке досліджено методами нелінійного аналізу у напівупорядкованих банахових просторах. Для розглядуваної крайової задачі отримано умови існування єдиного додатного розв'язку та двобічної збіжності до нього послідовних наближень. Для розрахунків та графічного подання результатів використано пакет Mathematica 12. Обчислюваний експеримент в задачі проведено для трьох областей: круг, півкруг та квадрат. Для кожного випадку отримано залежності норми розв'язку задачі від параметра λ .

ABSTRACT

Introductory note: 64 pages, 6 tables, 10 figures, 1 appendix, 30 sources.

HETEROTONE OPERATOR, ARRHENIUS'S LAW, TWO-SIDED APPROXIMATIONS METHOD, HAMMERSTEIN EQUATION, STRONGLY INVARIANT CONE SEGMENT, THERMOCHEMICAL PROCESS, GREEN'S FUNCTION.

Object of research – thermochemical processes.

Purpose of work – investigation by two-sides approximations method of thermochemical processes described by nonlinear elliptic boundary value problems.

Methods of research – methods of theory of nonlinear operator equations in semi-ordered Banach spaces and methods of mathematical physics for theoretical research of the considered nonlinear elliptic boundary value problem and two-sided iterative method of its solution.

The qualification work is devoted to the study by the method of two-sided approximations based on the use of the Green's function of the nonlinear elliptic boundary value problem, which is a mathematical model of the thermochemical process. The construction of two-sided approximations is based on the transition using the Green's function method to the equivalent Hammerstein integral equation, which was studied by nonlinear analysis methods in semi-ordered Banach spaces. For the considered boundary value problem, the conditions for the existence of a single positive solution and two-sided convergence of successive approximations to it are obtained. The Mathematica 12 package was used for calculations and graphical presentation of the results. The calculated experiment in the problem was performed for three areas: circle, semi-circle and square. For each case, the dependences of the problem solving norm on the parameter λ are obtained.

ЗМІСТ

	С.
Вступ	7
1 Аналіз предметної області та постановка задач дослідження	9
1.1 Математичні моделі процесів термохімії	9
1.2 Методи чисельного аналізу термохімічних процесів	17
1.3 Змістовна та формальна постановка задачі	19
1.4 Постановка задач дослідження	20
2 Вибір та обґрунтування методу розв'язання	21
2.1 Основні відомості з теорії нелінійних операторів у напівупорядкованих банахових просторах	21
2.2 Метод двобічних наближень для рівнянь з гетеротонним оператором ...	26
2.3 Метод двобічних наближень на основі використання функції Гріна розв'язання задачі Діріхле для напівлінійного еліптичного рівняння другого порядку	29
2.4 Дослідження методом двобічних наближень на основі використання функції Гріна нелінійної еліптичної крайової задачі, що є математичною моделлю термохімічного процесу	39
3 Програмна реалізація	44
3.1 Система комп'ютерної алгебри Mathematica 12	44
3.2 Алгоритм розв'язання задачі дослідження термохімічних процесів	45
3.3 Опис програми	46
4 Результати обчислювального експерименту та їх аналіз	47
Висновки	57
Перелік джерел посилання	58
Додаток А Лістинг програми	61

ВСТУП

Актуальність теми. Одним із найбільш часто використовуваних методів дослідження явищ і процесів у хімічній кінетиці та теорії горіння є математичне моделювання. Математичною моделлю цих явищ зазвичай є крайова або початкова крайова задача нелінійних диференціальних рівнянь. У більшості випадків ці задачі неможливо дослідити аналітично, тому для їх розв'язання використовуються чисельні методи. Чисельними методами, які використовуються при розв'язанні таких задач, є сіткові методи, метод скінченних елементів, метод Ньютона-Канторовича та метод двосторонніх наближень. Останній метод дуже зручний у програмній реалізації і дозволяє апроксимувати невідомий розв'язок шляхом апроксимації його двома послідовностями функцій знизу та зверху відповідно. Це дає можливість отримати зручну апостеріорну оцінку похибки наближеного розв'язку та довести існування вихідного розв'язку задачі.

Історично першим методом з двобічним типом збіжності був метод розв'язання початкової задачі, розроблений у 1919 р. С.О. Чаплигіним. Сучасний етап розвитку двобічних ітераційних методів пов'язаний з застосуванням теорії нелінійних операторів у напівупорядкованих банахових просторах.

Отже, актуальним є дослідження нелінійних крайових задач, які є математичними моделями термохімічних процесів, за допомогою методів двобічних наближень.

Мета і завдання кваліфікаційної роботи. Метою кваліфікаційної роботи є дослідження методом двобічних наближень на основі використання функції Гріна термохімічних процесів, що описуються нелійними еліптичними крайовими задачами.

Для досягнення поставленої мети треба виконати наступні завдання:

- провести аналіз математичних моделей процесів термохімії;
- ознайомитися із методами отримання наближених розв'язків нелінійних задач математичної фізики (зокрема, методом двобічних наближень);
- розробити алгоритм чисельного дослідження методом двобічних на-

ближень на основі використання функції Гріна нелінійної еліптичної крайової задачі, що є математичною моделлю термохімічного процесу;

– виконати програмну реалізацію розробленого алгоритму у системі комп'ютерної алгебри Mathematica 12;

– провести низку обчислювальний експеримент для тестових задач.

Об'єктом дослідження є термохімічні процеси.

Предметом дослідження є нелінійні еліптичні крайові задачі, що є математичними моделями термохімічних процесів, та методи їх чисельного аналізу.

Методи дослідження. У кваліфікаційній роботі використовуються методи теорії нелінійних операторних рівнянь у напівупорядкованих банахових просторах і методи математичної фізики для теоретичного дослідження розглядуваної нелінійної еліптичної крайової задачі та двобічного ітераційного методу її розв'язання.

Публікації. Результати, отримані у кваліфікаційній роботі, було представлено на 25-му Міжнародному молодіжному форумі «Радіоелектроніка та молодь у XXI столітті» (м. Харків, 20-22 квітня 2021 р.) [2].

1 АНАЛІЗ ПРЕДМЕТНОЇ ОБЛАСТІ ТА ПОСТАНОВКА ЗАДАЧ ДОСЛІДЖЕННЯ

1.1 Математичні моделі процесів термохімії

Найпотужнішим інструментом для аналізу різноманітних явищ і процесів сьогодні є математичне моделювання. Існуючі математичні моделі можна розділити на дві категорії – лінійні моделі та нелінійні моделі. Характеристикою лінійної математичної моделі є принцип суперпозиції: будь-яка лінійна комбінація розв’язків рівнянь, що містяться в моделі, є також їх розв’язком. Лінійні моделі легко аналізувати, для них розроблено багато методів аналізу та чисельного дослідження. Однак більшість реальних процесів і відповідних їм математичних моделей є нелінійними, і їх лінеаризацію можна використовувати лише як перше наближення до реальності. Крім того, існують нелінійні математичні моделі, лінеаризація яких принципово неможлива.

Математичне моделювання хімічної кінетики, фізики плазми, теорії горіння, біології, екології та інших процесів призводить до необхідності вивчення нелінійних рівнянь математичної фізики [3, 17, 27].

Одним із основних принципів створення математичних моделей різноманітних процесів є використання закону збереження енергії [17, 21, 27]. Якщо розглядати явище, у якому процес реакції супроводжується дифузією, то за принципом збереження енергії можна отримати рівняння або систему рівнянь у частинних похідних для опису характеристик цього процесу. Такими характеристиками можуть бути температура в теплопровідності, масова концентрація в хімічній кінетиці та щільність потоку нейтронів в ядерних реакторах. Щоб отримати ці рівняння, розглянемо величину $u(\mathbf{x}, t)$, яка називається функцією густини в точці \mathbf{x} дифузійного середовища Ω з \mathbb{R}^n і час t . Відповідно до принципу збереження, для будь-якої підмножини R у Ω з межевою поверхнею S швидкість зміни масової густини дорівнює потоку S , що проходить, плюс швидкість генерації маси в R . Це твердження є коефіцієнтом балансу, де шви-

дкість потоку, представлена \mathbf{J} вектором, визначається як щільність потоку за одиницю часу та одиницю площі поверхні [27].

Нехай $\boldsymbol{\nu}$ – зовнішній вектор нормалі S та q_0 – швидкість продукування маси одиниці об’єму за одиницю часу в R . Припустимо, що u , \mathbf{J} і q_0 неперервні за \mathbf{x} і \mathbf{J} неперервно диференційовні за \mathbf{x} , та u можна безперервно диференціювати за t . Тоді коефіцієнт балансу можна записати як

$$\frac{d}{dt} \int_R a_0 u d\mathbf{x} = - \int_S (\mathbf{J}, \boldsymbol{\nu}) ds + \int_R q_0 d\mathbf{x}, \quad (1.1)$$

де a_0 – константа пропорційності, що залежить від типу розглянутої задачі.

Наприклад, у процесі хімічних реакцій a_0 – число Льюїса, а в задачі про теплопровідність – добуток густини та питомої теплоємності. У (1.1) знак «мінус» у поверхневому інтегралі за поверхнею S – це потік густини, що проходить через межу поверхні S в області R . Завдяки теоремі Гаусса-Остроградського

$$\int_S (\mathbf{J}, \boldsymbol{\nu}) ds = \int_R (\nabla, \mathbf{J}) d\mathbf{x},$$

де ∇ – це оператор градієнта за \mathbf{x} .

Тому рівняння (1.1) зводиться до вигляду

$$\int_R \left(a_0 \frac{\partial u}{\partial t} + (\nabla, \mathbf{J}) - q_0 \right) d\mathbf{x} = 0.$$

Через неперервність $\frac{\partial u}{\partial t}$, (∇, \mathbf{J}) та довільність підмножини R отримаємо, що

$$a_0 \frac{\partial u}{\partial t} + (\nabla, \mathbf{J}) - q_0 = 0 \text{ в } \Omega. \quad (1.2)$$

Щоб зв'язати дифузний потік \mathbf{J} з функцією густини u , необхідно використувати певні фізичні принципи. Для різних предметних областей цей принцип має різні назви: закон Фіка в хімічних реакціях, закон Фур'є в задачах теплопровідності та закон Дарсі в пористих середовищах [27]. У кожному з цих випадків закон стверджує, що за відсутності конвекції швидкість потоку пропорційна зворотній градієнтній щільності

$$\mathbf{J} = -D^* \nabla u \quad (1.3)$$

де D^* є додатною функцією в Ω . Після підстановки (1.3) в (1.2) маємо рівняння

$$\frac{\partial u}{\partial t} = (\nabla, D \nabla u) + q, \quad (1.4)$$

де $D = \frac{D^*}{a_0}$, $q = \frac{q_0}{a_0}$. Функцію D називають коефіцієнтом дифузії в процесі хімічної дифузії або теплопровідністю в задачі теплопровідності. Вираз $(\nabla, D \nabla u) = \text{div}(D \nabla u)$ дорівнює швидкості зміни маси, викликаній дифузійною, а q – швидкості зміни маси, викликаній реакцією. Значення q – це масова щільність, що утворюється під час реакції або взаємодії, на одиницю об'єму за одиницю часу. Коли q є відомою функцією, рівняння (1.4) є рівнянням лінійної дифузії або рівнянням теплопровідності. Для багатьох практичних процесів значення q залежить від функції густини u і, безумовно, може залежати від (\mathbf{x}, t) . Припускаючи, що $q = f(\mathbf{x}, t, u)$, рівняння (1.4) призводить до рівняння «реакція-дифузія»

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \operatorname{div}(D\nabla u) = f(\mathbf{x}, t, u). \quad (1.5)$$

Коли відбувається стаціонарний процес реакції-дифузії, функція густини $u \equiv u(\mathbf{x})$ втрачає залежність t від часу. Це означає $\frac{\partial u}{\partial t} = 0$, тому рівняння (1.5) набуває вигляду

$$-\operatorname{div}(D\nabla u) = f(\mathbf{x}, u). \quad (1.6)$$

Рівняння (1.6) називають рівнянням стаціонарної реакції-дифузії. З точки зору математичної фізики рівняння (1.6) є напівлінійним еліптичним рівнянням.

Якщо область Ω , де відбувається дифузія, є обмеженою областю в \mathbb{R}^n , то рівняння «реакція-дифузія» доповнюється відповідними граничними умовами на межі $\partial\Omega$. Відповідні граничні умови залежать від фізичного механізму дифузійного середовища. Граничні умови зазвичай залежать від властивостей матеріалу всередині і зовні дифузійного середовища.

Коли функція густини задана на межі $\partial\Omega$, то крайова умова задається у вигляді

$$u(\mathbf{x}, t) = h(\mathbf{x}, t) \quad (t > 0, \mathbf{x} \in \partial\Omega), \quad (1.7)$$

де h – щільність резервуара, з яким стикається дифузійне середовище. Умова (1.7) називається першою крайовою умовою або умовою Діріхле.

Також можливі інші типи граничних умов (наприклад, Неймана або Роббена) або комбінації різних типів граничних умов.

У процесі неізотермічної хімічної реакції бере участь кілька хімічних речовин. Стандартизована концентрація і температура хімічної речовини описуються системою рівнянь «реакція-дифузія» у вигляді (1.5). У випадку окремої речовини, якщо коефіцієнт дифузії та теплопровідність сталі, рівняння концен-

трації u та температури v записується таким чином

$$\frac{\partial u}{\partial t} - D_1 \Delta u = -a_1 f(u, v) \text{ у } \Omega, t > 0, \quad (1.8)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} - D_2 \Delta v = a_2 f(u, v) \text{ у } \Omega, t > 0, \quad (1.9)$$

де Δ – оператор Лапласа;

a_1 – це число Тіля;

$\frac{a_2}{a_1}$ – температура Пратера.

В теорії горіння аналогічними рівняннями описується концентрація горючого матеріалу u і температури v .

Стационарний варіант системи (1.8), (1.9) має вигляд

$$-D_1 \Delta u = -a_1 f(u, v) \text{ у } \Omega, \quad (1.10)$$

$$-D_2 \Delta v = a_2 f(u, v) \text{ у } \Omega, \quad (1.11)$$

і може бути зведений до двох незалежних рівнянь.

Для системи (1.10), (1.11) розглянемо випадок умов Діріхле:

$$u = h_1, v = h_2 \text{ на } \partial\Omega. \quad (1.12)$$

Помноживши рівняння (1.10) на a_2 , а рівняння (1.11) на a_1 та додавши їх, отримаємо рівняння

$$-\Delta(a_2 D_1 u + a_1 D_2 v) = 0.$$

Аналогічно з крайових умов (1.12) отримаємо, що

$$a_2 D_1 u + a_1 D_2 v = a_2 D_1 h_1 + a_1 D_2 h_2.$$

Отже, для нової функції $w = a_2 D_1 u + a_1 D_2 v$ маємо лінійну крайову задачу

$$-\Delta w = 0 \text{ у } \Omega, \quad (1.13)$$

$$w = a_2 D_1 h_1 + a_1 D_2 h_2 \text{ на } \partial\Omega. \quad (1.14)$$

Якщо $a_0 = a_2 D_1 h_1 + a_1 D_2 h_2$ – стала, то $w = a_0$ буде розв'язком задачі (1.13), (1.14). Тоді $u = \frac{a_0 - a_1 D_2 v}{a_2 D_1}$, а функція v знаходиться як розв'язок задачі

$$-D_2 \Delta v = a_2 f \left(\frac{a_0 - a_1 D_2 v}{a_2 D_1}, v \right) \text{ у } \Omega, \quad (1.15)$$

$$v = h_2 \text{ на } \partial\Omega. \quad (1.16)$$

Припустимо, що розглядається необоротна реакція нульового порядку. Тоді функція f задається у вигляді

$$f(u, v) = r(v).$$

За кінетикою Арреніуса функція $r(v)$ визначається рівнянням

$$\frac{d}{dv}(\ln r) = \frac{E}{Rv^2}, \quad (1.17)$$

де E – енергія активації;

R – універсальна газова стала.

З (1.17) знаходимо, що

$$r(v) = r_0 e^{-\frac{E}{Rv}} \equiv e^{\gamma - \frac{\gamma}{v}},$$

де $\gamma = \frac{E}{R}$ – число Арреніуса;

$$r_0 = e^\gamma.$$

Отже, функція реакції f набуває вигляду

$$f(u, v) = e^{\gamma - \frac{\gamma}{v}},$$

а задача (1.15), (1.16) – вигляду

$$-D_2 \Delta v = a_2 e^{\gamma - \frac{\gamma}{v}} \text{ у } \Omega, \quad (1.15)$$

$$v = h_2 \text{ на } \partial\Omega. \quad (1.16)$$

В теорії горіння існують різні варіанти рівняння (1.15), які засновані на різних апроксимаціях виразу Арреніуса $r(v)$.

Нехай $\delta v = v - v_e$ — різниця між температурою v та температурою реакції v_e (v_e — початкова температура у разі самозаймання, а найвища температура контуру у разі поширення вогню). Тоді

$$\frac{\gamma}{v} = \frac{\gamma}{v_e + \delta v} = \frac{\gamma b}{1 + b\delta v} = \gamma b \left(1 - \frac{b\delta v}{1 + b\delta v} \right),$$

де $b = \frac{1}{v_e}$.

Увівши функцію $\psi \equiv \gamma b^2 \delta v = \frac{\gamma(v - v_e)}{v_e^2}$, отримаємо, що

$$\frac{\gamma}{v} = \gamma b - \frac{\psi}{1 + \frac{\psi}{\gamma b}}$$

і задача (1.15), (1.16) набуде вигляду

$$\begin{aligned} -\Delta\psi &= \lambda e^{\frac{\psi}{1+\alpha\psi}} \text{ у } \Omega, \\ \psi &= \beta \text{ на } \partial\Omega, \end{aligned}$$

$$\text{де } \lambda = \frac{a_2\gamma}{D_2v_e^2} e^{\gamma(1-b)}, \quad \alpha = \frac{1}{\gamma b}, \quad \beta = \frac{\gamma}{v_e^2} (h_2 - v_e).$$

Іншу версію рівняння (1.15) отримаємо за допомогою розкладання за формулою Тейлора

$$\frac{1}{v} = \frac{1}{v_e + \delta v} = \frac{b}{1 + b\delta v} = b - b^2\delta v + o(\delta v).$$

Тоді, нехтуючи величинами $o(\delta v)$, для функції $\varphi \equiv \gamma b^2\delta v = \gamma b^2(v - v_e)$ отримаємо задачу

$$\begin{aligned} -\Delta\varphi &= \mu e^\varphi \text{ у } \Omega, \\ \varphi &= \eta \text{ на } \partial\Omega, \end{aligned}$$

$$\text{де } \mu = \frac{a_2\gamma b^2}{D_2} e^{\gamma(1-b)}, \quad \eta = \gamma b^2(h_2 - v_e).$$

Рівняння останньої задачі часто називають експоненціальним наближенням (1.15) (чи рівнянням Ліувілля-Гельфанда-Брату) і воно відіграє важливу роль в теорії теплових вибухів [21, 27].

1.2 Методи чисельного аналізу термохімічних процесів

Математичне моделювання є найбільш поширеним методом у вивченні задач хімічної кінетики, фізики плазми, теорії горіння та біології. Застосування його до цих процесів призводить до крайових задач, які потребують використання методів чисельного аналізу нелінійних рівнянь математичної фізики. Можна виділити такі методи розв'язання нелінійної крайової задачі як метод скінченних різниць, метод лінеаризації Ньютона-Канторовича, метод двосторонньої апроксимації, заснований на використанні функції Гріна, та методу малого параметру [1, 4, 5, 10, 15, 16, 22, 26, 29].

Метод скінченних різниць (або метод сітки) полягає у використанні нелінійної алгебри або трансцендентних рівнянь замість нелінійних диференціальних рівнянь. Ця система розв'язується за допомогою деяких ітераційних методів, таких як метод Ньютона. Розв'язок початкової крайової задачі отримано у вигляді масиву-каркасу наближеного розв'язку, згідно з яким наближений розв'язок можна отримати як неперервну функцію за допомогою апарату теорії інтерполяції. Для похибки цього методу існує теоретична похибка оцінки, яка залежить від розміру кроку сітки.

Метод лінеаризації Ньютона-Канторовича полягає в зведенні вихідної нелінійної задачі до серії лінійних задач. Для розв'язання кожної з цих лінійних задач можна використовувати сіткові, варіаційні чи проєкційні методи. Метод Ньютона-Канторовича має квадратичну швидкість збіжності, але вона значною мірою залежить від вибору початкового наближення.

Метод двосторонньої апроксимації дозволяє побудувати дві послідовності функцій, які збігаються до точного розв'язку задачі з обох боків (зверху та знизу). Це дає змогу отримати апостеріорну оцінку похибки для кожної ітерації, що дає дійсно зручний критерій для завершення ітерацій. Реалізація цього методу базується на перетворенні вихідної нелінійної крайової задачі з використанням функції Гріна до еквівалентного інтегрального рівняння Гаммершейна, яке досліджується методом нелінійного функціонального аналізу в напіввпоряд-

дкованому просторі.

У методі малого параметра розв'язок задачі має форму ряду, в якому кожен член ряду є розв'язком допоміжної задачі. Треба мати на увазі, що ці допоміжні задачі зазвичай можна розв'язувати тільки чисельно. Коли використовується метод малого параметру, сума деяких частин ряду використовується як наближений розв'язок, тому проблема оцінки похибки досі не вирішена.

У [13, 16] застосування методу сіток до розв'язання задач для квазілінійного рівняння теплопровідності розглянуто на прикладі першої початково-крайової задачі для рівняння

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(k(u) \frac{\partial u}{\partial x} \right) + f(u).$$

У цій роботі побудовано чисто неявні різницьві схеми, які є лінійними та нелінійними відносно шуканих сіткових функцій. Застосуванню методу сіток до чисельного дослідження задач конвекції-дифузії та різноманітних задач теплопровідності присвячені роботи [14, 15, 23].

Задачу математичного моделювання нелінійної масової дифузії розширеним методом скінченних елементів розглянуто у [28] на прикладі задачі для рівняння $-\nabla(k(u)\nabla u) = 0$, причому область, у якій розглядається задача складається з двох під областей, у яких $k(u)$ приймає різні значення. Роботу запропонованого алгоритму продемонстровано на розв'язанні тестової задачі.

Нелінійні задачі математичної фізики також чисельно досліджувалися структурним методом (методом R -функцій). Наприклад, у роботі [11] методом R -функцій здійснено математичне моделювання теплового самозаймання для стаціонарних умов і знайдено для прямокутної та хрестоподібної областей критичне значення параметра Франк-Каменецького. Багато застосувань структурно-варіаційного методу до розв'язання нелінійних задач теплопровідності розглянуто у [12]. Застосування цього методу у нелінійних задачах дає гарні результати, що підтверджується фізичними експериментами, але є не достатньо

теоретично обґрунтованим.

Двобічні ітераційні методи розв'язання нелінійних задач математичної фізики, засновані на переході (за допомогою методу функцій Гріна або методу квазіфункцій Гріна-Рвачова) до еквівалентного інтегрального рівняння Гаммерштейна, були розроблені в роботах М.В. Сидорова [19]. Зокрема, у роботі [5] була чисельно досліджена задача Ліувілля-Гельфанда-Брату.

Також можна виділити роботу [30], у якій застосовується штучна нейронна мережа для знаходження чисельного розв'язку одновимірних задач $u'' + \lambda e^{\frac{u}{1+\alpha u}} = 0$, $x \in (0; 1)$, $u(0) = u(1) = 0$, і $u'' = \lambda u e^{\frac{\gamma\beta(1-u)}{1+\beta(1-u)}}$, $x \in (0; 1)$, $u'(0) = 0$, $u(1) = 1$, які моделюють процеси хімічних реакцій.

1.3 Формальна та змістовна постановка задачі

Нехай в обмеженій області $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ відбувається необоротна хімічна реакція нульового порядку відповідно до кінетики Арреніуса і $u = u(\mathbf{x})$ означає щільність речовини в точці $\mathbf{x} \in \Omega$. Вважаємо, що на межі $\partial\Omega$ області Ω концентрація речовини є нульовою. Тоді для моделювання відповідного термохімічного процесу можна поставити таку нелінійну крайову задачу

$$-\Delta u = \lambda e^{\frac{u}{1+\alpha u}}, \mathbf{x} \in \Omega, \quad (1.17)$$

$$u(\mathbf{x}) > 0, \mathbf{x} \in \Omega, \quad (1.18)$$

$$u(\mathbf{x}) = 0, \mathbf{x} \in \partial\Omega. \quad (1.19)$$

У задачі (1.17) – (1.19) λ , α – додатні параметри, які характеризують кінетику термохімічного процесу.

1.4 Постановка задач дослідження

Виходячи з проведеного аналізу математичних моделей хімічної кінетики та методів їх чисельного аналізу, м зробити висновок про перспективність використання для дослідження процесі хімічної кінетики методу двобічних наближень.

Отже, метою кваліфікаційної роботи є дослідження методом двобічних наближень на основі використання функції Гріна термохімічних процесів, що описуються нелінійними еліптичними крайовими задачами.

Для досягнення поставленої мети треба виконати наступні завдання:

- провести аналіз математичних моделей процесів термохімії;
- ознайомитися із методами отримання наближених розв'язків нелінійних задач математичної фізики (зокрема, методом двобічних наближень);
- розробити алгоритм чисельного дослідження методом двобічних наближень на основі використання функції Гріна нелінійної еліптичної крайової задачі, що є математичною моделлю термохімічного процесу;
- виконати програмну реалізацію розробленого алгоритму у системі комп'ютерної алгебри Mathematica 12;
- провести низку обчислювальний експеримент для тестових задач.

2 ВИБІР ТА ОБҐРУНТУВАННЯ МЕТОДУ РОЗВ'ЯЗАННЯ

2.1 Основні відомості з теорії нелінійних операторів у напівупорядкованих банахових просторах

Наведемо основні відомості з теорії нелінійних операторів, які діють у напівупорядкованих банахових просторах [6, 9].

Нехай \mathcal{U} – дійсний банахів простір, θ – нульовий елемент простору \mathcal{U} .

Означення 2.1. Конусом називається замкнута опукла множина $\mathcal{K} \subset \mathcal{U}$, яка разом з кожною точкою u містить промінь, що проходить через u , та якщо з u , $-u \in \mathcal{K}$ випливає, що $u = \theta$.

Таким чином, для конуса \mathcal{K} виконуються наступні умови:

- а) якщо $u \in \mathcal{K}$ і $u \neq \theta$, то $\alpha u \in \mathcal{K}$ для будь-якого $\alpha \geq 0$;
- б) якщо $u \in \mathcal{K}$ і $u \neq \theta$, то $-u \notin \mathcal{K}$.

У просторі $C(\bar{\Omega})$ функцій, неперервних на множині $\bar{\Omega}$ ($\bar{\Omega}$ – вимірний компакт у \mathbb{R}^n), конусом, наприклад, є множина невід'ємних функцій, тобто

$$\mathcal{K}_+ = \{u \in C(\bar{\Omega}) : u(\mathbf{x}) \geq 0 \text{ для всіх } \mathbf{x} \in \bar{\Omega}\}.$$

Якщо банаховому простору \mathcal{U} виділено конус \mathcal{K} , то в просторі \mathcal{U} можна ввести напівупорядкованість, тобто відношення часткового порядку.

Означення 2.2. Для $u, v \in \mathcal{U}$ пишуть $u \leq v$, якщо $v - u \in \mathcal{K}$.

Напівупорядкованість, яка вводиться конусом \mathcal{K}_+ у просторі $C(\bar{\Omega})$, має такий зміст:

$$u \leq v := u(\mathbf{x}) \leq v(\mathbf{x}) \text{ для всіх } \mathbf{x} \in \bar{\Omega}.$$

Означення 2.3. Додатними називаються елементи $u \geq \theta$, тобто елементи $u \in \mathcal{K}$.

Означення 2.4. Множина вигляду

$$\langle v, w \rangle := \{u \in \mathcal{U} : v \leq u \leq w\}$$

називається конусним відрізком $\langle v, w \rangle$ просторі \mathcal{U} , який напівупорядковано за допомогою конуса \mathcal{K} .

Таким чином, якщо $u \in \langle v, w \rangle$, то

$$u - v \in \mathcal{K} \text{ і } w - u \in \mathcal{K}.$$

Розглянемо один різновид конусу у банахових просторах [6, 9].

Означення 2.5. Нормальним називається такий конус \mathcal{K} , що існує таке число $N(\mathcal{K}) > 0$, що з $\theta \leq u \leq v$ випливає нерівність

$$\|u\| \leq N(\mathcal{K}) \|v\|.$$

У цьому випадку кажуть, що норма має властивість напівмонотонності.

Число $N(\mathcal{K})$ має назву константи нормальності конусу \mathcal{K} . У випадку, коли $N(\mathcal{K}) = 1$, конус називають гострим і кажуть, що норма монотонна.

Конус \mathcal{K}_+ у просторі $C(\bar{\Omega})$ є нормальним (і навіть гострим). Дійсно, норма у просторі $C(\bar{\Omega})$ вводиться за допомогою рівності

$$\|u\| = \max_{\mathbf{x} \in \bar{\Omega}} |u(\mathbf{x})|.$$

Тоді, якщо $u \leq v$, то $u(\mathbf{x}) \leq v(\mathbf{x})$ для всіх $\mathbf{x} \in \bar{\Omega}$ і

$$\|u\| = \max_{\mathbf{x} \in \bar{\Omega}} |u(\mathbf{x})| \leq \max_{\mathbf{x} \in \bar{\Omega}} |v(\mathbf{x})| = \|v\|.$$

Напівупорядкованість банахова простору \mathcal{U} деяким конусом \mathcal{K} може бути ефективно використана при дослідженні оператора T , що діє в просторі \mathcal{U} , лише у тому випадку, коли T має якісь властивості, пов'язані з напівупорядкованістю. Наведемо означення основних типів операторів, які використовуватимуться в подальшому [6, 9].

Означення 2.9. Додатнім оператором називається оператор $T : \mathcal{U} \rightarrow \mathcal{U}$, який залишається інваріантним (перетворює в себе) конус \mathcal{K} .

Отже, для додатного оператора $T : \mathcal{U} \rightarrow \mathcal{U}$, якщо $u \in \mathcal{K}$, то $T(u) \in \mathcal{K}$.

Підклас додатних операторів складають так звані u_0 -додатні оператори. Нехай фіксовано деякий ненульовий елемент $u_0 \in \mathcal{K}$. Позначимо через $K(u_0)$ множину таких елементів $u \in \mathcal{K}$, для яких можна вказати числа $\alpha = \alpha(u) > 0$, $\beta = \beta(u) > 0$ такі, що

$$\alpha u_0 \leq u \leq \beta u_0.$$

Означення 2.10. Додатній оператор T називається u_0 -додатнім оператором, якщо він переводить ненульові елементи конуса \mathcal{K} в $K(u_0)$.

Отже, для u_0 -додатного оператора для будь-якого ненульового $u \in \mathcal{K}$ знайдуться числа $\alpha = \alpha(u) > 0$, $\beta = \beta(u) > 0$ такі, що

$$\alpha u_0 \leq T(u) \leq \beta u_0.$$

Найбільш використовувані у застосуваннях типи операторів, що діють в напівупорядкованих просторах, пов'язані з властивістю монотонності.

Означення 2.11. Ізотонним (монотонним) оператором називається оператор $T : \mathcal{U} \rightarrow \mathcal{U}$, для якого з $u, v \in \mathcal{U}$, $u \geq v$ випливає, що $T(u) \geq T(v)$.

Означення 2.12. Антитонним (антимонотонним) оператором називається оператор $T : \mathcal{U} \rightarrow \mathcal{U}$, для якого з $u, v \in \mathcal{U}$, $u \geq v$ випливає, що $T(u) \leq T(v)$.

Дамо тепер означення загального класу операторів, пов'язаних з властивістю своєрідної узагальненої монотонності.

Означення 2.13. Гетеротонним (мішано монотонним) оператором називається оператор $T : \mathcal{U} \rightarrow \mathcal{U}$ такий, що він допускає діагональне подання $T(u) \equiv \hat{T}(u, u)$, причому супровідний оператор $\hat{T} : \mathcal{U} \times \mathcal{U} \rightarrow \mathcal{U}$ монотонно зростає за v та спадає за w , тобто:

а) з $v_1, v_2 \in \mathcal{U}$, $v_1 \geq v_2$ випливає, що $\hat{T}(v_1, w) \geq \hat{T}(v_2, w)$;

б) з $w_1, w_2 \in \mathcal{U}$, $w_1 \geq w_2$ випливає, що $\hat{T}(v, w_1) \leq \hat{T}(v, w_2)$.

Вибір супровідного оператора $\hat{T}(v, w)$ завжди неоднозначний: наприклад, якщо $\hat{T}(v, w)$ супровідний оператор для T , то супровідним буде також оператор $\hat{T}(v, w) + v - w$. Далі, коли розглядатимемо гетеротонний оператор T , вважатимемо, що супровідний йому оператор \hat{T} уже є фіксованим.

Ізотонний та антитонний оператори є частинними випадками гетеротонного. Для ізотонного оператора за супровідний можна обрати $\hat{T}(v, w) \equiv T(v)$, для антитонного можна обрати $\hat{T}(v, w) \equiv T(w)$.

Наступні різновиди операторів, що діють в банахових просторах, напівопорядкованих за допомогою деякого конуса, пов'язані з характером зміни значення оператора уздовж променів, що лежать в конусі \mathcal{K} .

Означення 2.14. Увігнутиим оператором називається оператор $T : \mathcal{U} \rightarrow \mathcal{U}$, який є u_0 -додатний і для будь-яких $u \in K(u_0)$ та $\tau \in (0, 1)$

$$T(\tau u) \geq \tau T(u), \quad (2.1)$$

причому в (2.1) неможлива рівність.

Таким чином, для увігнутого оператора T існує такий ненульовий елемент $u_0 \in \mathcal{K}$, що виконуються наступні умови:

а) для будь-якого $u \in \mathcal{K}$ справджуються нерівності $\alpha u_0 \leq T(u) \leq \beta u_0$, де

$\alpha = \alpha(u) > 0$, $\beta = \beta(u) > 0$;

б) для всіх $u \in \mathcal{K}$ таких, що $\alpha_1 u_0 \leq u \leq \beta_1 u_0$ ($\alpha_1 = \alpha_1(u) > 0$, $\beta_1 = \beta_1(u) > 0$), справджуються нерівності $T(\tau u) \geq \tau T(u)$, $T(\tau u) \neq \tau T(u)$, де $\tau \in (0, 1)$.

Означення 2.15. Увігнутий оператор $T : \mathcal{U} \rightarrow \mathcal{U}$ називається u_0 -увігнутиим, якщо він u_0 -додатний та для будь-яких $u \in K(u_0)$ і $\tau \in (0, 1)$ знайдеться таке $\eta = \eta(u, \tau) > 0$, що

$$T(\tau u) \geq \tau(1 + \eta)T(u).$$

Близьке до увігнутості поняття вводиться і для гетеротонних операторів.

Означення 2.16. Псевдоувігнутиим називається такий додатний гетеротонний оператор $T : \mathcal{U} \rightarrow \mathcal{U}$, що $\hat{T}(v, w) \in K(u_0)$ для будь-яких ненульових $v, w \in \mathcal{K}$ і для будь-яких $v, w \in K(u_0)$ та $\tau \in (0, 1)$

$$\hat{T}\left(\tau v, \frac{1}{\tau} w\right) \geq \tau \hat{T}(v, w), \quad (2.2)$$

причому в (2.2) неможлива рівність.

Таким чином, для псевдоувігнутого оператора T існує такий ненульовий елемент $u_0 \in \mathcal{K}$, що виконуються наступні умови:

а) для будь-яких $v, w \in \mathcal{K}$ ($v \neq \theta$, $w \neq \theta$) справджуються нерівності $\alpha u_0 \leq \hat{T}(v, w) \leq \beta u_0$, де $\alpha = \alpha(v, w) > 0$, $\beta = \beta(v, w) > 0$;

б) для кожних таких $v, w \in K(u_0)$, що $\alpha_1 u_0 \leq v \leq \beta_1 u_0$, $\alpha_2 u_0 \leq w \leq \beta_2 u_0$ ($\alpha_1 = \alpha_1(v) > 0$, $\beta_1 = \beta_1(v) > 0$, $\alpha_2 = \alpha_2(w) > 0$, $\beta_2 = \beta_2(w) > 0$), справджуються нерівності $\hat{T}\left(\tau v, \frac{1}{\tau} w\right) \geq \tau \hat{T}(v, w)$, $\hat{T}\left(\tau v, \frac{1}{\tau} w\right) \neq \tau \hat{T}(v, w)$, де $\tau \in (0, 1)$.

Означення 2.17. Псевдоувігнутий оператор $T : \mathcal{U} \rightarrow \mathcal{U}$ називається

u_0 -псевдоувігнутим, якщо для будь-яких $v, w \in K(u_0)$ та $\tau \in (0, 1)$ можна вказати таке $\eta(v, w, \tau) > 0$, що

$$\hat{T}\left(\tau v, \frac{1}{\tau} w\right) \geq \tau[1 + \eta(v, w, \tau)]\hat{T}(v, w).$$

Зауважимо, що для ізотонного оператора T , якщо за супровідний оператор обрано $\hat{T}(v, w) = T(v)$, то означення псевдоувігнутого (u_0 -псевдоувігнутого) оператора переходить в означення увігнутого (u_0 -увігнутого) оператора.

2.2 Метод двобічних наближень для рівнянь з гетеротонним оператором

Означення 2.18. Сильно інваріантним конусним відрізком для гетеротонного оператора $T : \mathcal{U} \rightarrow \mathcal{U}$ називається такий конусний відрізок $\langle v_0, w_0 \rangle$, що

$$\hat{T}(v_0, w_0) \geq v_0, \quad \hat{T}(w_0, v_0) \leq w_0. \quad (2.3)$$

Введемо таку умову (A) [9]: система рівнянь

$$\hat{T}(v, w) = v, \quad \hat{T}(w, v) = w \quad (2.4)$$

на множині $M \subset \mathcal{U}$ не має розв'язків таких, що $v \neq w$.

Має місце така теорема [9].

Теорема 2.1. Нехай конусний відрізок $\langle v_0, w_0 \rangle$ є сильно інваріантним для гетеротонного оператора $T : \mathcal{U} \rightarrow \mathcal{U}$. Нехай, крім того, конус \mathcal{K} є нормальним, а оператор \hat{T} є цілком неперервним. Тоді оператор T має нерухому точку

$x^* \in \langle v_0, w_0 \rangle$.

Нехай $T : \mathcal{U} \rightarrow \mathcal{U}$ – гетеротонний оператор, а $\hat{T} : \mathcal{U} \times \mathcal{U} \rightarrow \mathcal{U}$ – супровідний оператор. Розглянемо ітераційний процес

$$v_{n+1} = \hat{T}(v_n, w_n), \quad w_{n+1} = \hat{T}(w_n, v_n), \quad (2.5)$$

який починається в точці (v_0, w_0) .

Має місце таке твердження [9].

Теорема 2.2. Нехай конусний відрізок $\langle v_0, w_0 \rangle$ є сильно інваріантним для гетеротонного оператора T , конус \mathcal{K} є нормальним, а оператор \hat{T} є цілком неперервним. Тоді ітераційний процес (2.5) збігається, тобто $v_n \rightarrow v^*$, $w_n \rightarrow w^*$, причому

$$v_0 \leq v_1 \leq \dots \leq v_n \leq \dots \leq v^* \leq w^* \leq \dots \leq w_n \leq \dots \leq w_1 \leq w_0.$$

Крім того, якщо $y_0 \in \langle v_0, w_0 \rangle$, $z_0 \in \langle v_0, w_0 \rangle$ і $y_{n+1} = \hat{T}(y_n, z_n)$, $z_{n+1} = \hat{T}(z_n, y_n)$, то для будь-якого $n \geq 0$ мають місце нерівності $v_n \leq y_n \leq w_n$, $v_n \leq z_n \leq w_n$.

Якщо оператор \hat{T} є неперервним, то пара (v^*, w^*) є розв'язком системи (2.4). Якщо ще виконується й умова (А), то виключена можливість $v^* \neq w^*$. Це означає, що точка $u^* := v^* = w^*$ є нерухомою точкою оператора T , тобто розв'язком рівняння $u = T(u) \equiv \hat{T}(u, u)$, що приводить нас до наступного результату [9].

Теорема 2.3. Нехай виконані умови теореми 2.2. Крім того, нехай оператор \hat{T} є неперервним і на $\langle v_0, w_0 \rangle$ виконується умова (А). Тоді у T на $\langle v_0, w_0 \rangle$ існує єдина нерухома точка x^* , до якої збігаються послідовні ітерації $T^n(u)$ незалежно від $u \in \langle v_0, w_0 \rangle$.

Зазначимо, що за виконання умов теореми 2.3 $v_n \rightarrow u^*$, $w_n \rightarrow u^*$, причому

$$v_0 \leq v_1 \leq \dots \leq v_n \leq \dots \leq x^* \leq \dots \leq w_n \leq \dots \leq w_1 \leq w_0. \quad (2.6)$$

Якщо для послідовностей $\{v_n\}$, $\{w_n\}$ справджується ланцюг нерівностей (2.6), то кажуть, що ітераційний процес (2.5) двобічно збігається до u^* , а відповідний ітераційний метод називають методом двобічних наближень.

Перевірка умови (A) може виявитися складною задачею. Наведемо деякі достатні умови її виконання [9].

Теорема 2.4. Нехай виконані умови теореми 2.2, оператор \hat{T} є неперервним і має місце така умова:

$$\hat{T}(v + u, w - u) \geq \hat{T}(v, w) + u, \quad (2.7)$$

де $u > \theta$, $v < w$, $v, w, v + u, w - u \in \langle v_0, w_0 \rangle$.

Тоді на сильно інваріантному конусному відрізку $\langle v_0, w_0 \rangle$ виконано умову (A).

Зауважимо також, що достатньою умовою виконання умови (A) є умова [24] існування такого $\gamma \in (0;1)$, що

$$\|\hat{T}(v, w) - \hat{T}(w, v)\| \leq \gamma \|v - w\| \text{ для всіх } v, w \in \langle v_0, w_0 \rangle. \quad (2.8)$$

І нарешті зазначимо, що умова (A) виконується для u_0 -псевдоувігнутих операторів, а саме справджується наступна теорема [122, 123].

Теорема 2.5. Нехай для u_0 -псевдоувігнутого оператора T існує сильно інваріантний конусний відрізок $\langle v_0, w_0 \rangle \subset K(u_0)$ і виконуються умови теореми 2.1. Тоді оператор T має єдину нерухому точку $u^* \in K(u_0)$.

Теорема 2.6. Нехай u_0 -псевдоувігнутий оператор T є неперервним, має сильно інваріантний конусний відрізок $\langle v_0, w_0 \rangle \subset K(u_0)$ і виконуються умови теореми 2.2. Тоді оператор T має єдину нерухому точку $u^* \in K(u_0)$, до якої збігаються послідовні ітерації $T^n(u)$ при будь-якому $u \in \mathcal{K}$, $u \neq \theta$.

2.3 Метод двобічних наближень на основі використання функції Гріна розв'язання задачі Діріхле для напівлінійного еліптичного рівняння другого порядку

Розглянемо у обмеженій області $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ з кусково-гладкою межею $\partial\Omega$ ($\bar{\Omega} = \Omega \cup \partial\Omega$) для напівлінійного еліптичного рівняння задачі Діріхле вигляду

$$-\Delta u = f(\mathbf{x}, u), \quad \mathbf{x} \in \Omega, \quad (2.9)$$

$$u|_{\partial\Omega} = 0. \quad (2.10)$$

Вважатимемо, що функція $f(\mathbf{x}, u)$ неперервна і додатна при $\mathbf{x} \in \bar{\Omega}$, $u > 0$.

Функцією Гріна $G(\mathbf{x}, \mathbf{s})$ першої крайової задачі для оператора $-\Delta u$ називатимемо розв'язок задачі [8]

$$-\Delta G = \delta(\mathbf{x}, \mathbf{s}), \quad \mathbf{x} \in \Omega \quad (\mathbf{s} \in \Omega),$$

$$G|_{\partial\Omega} = 0,$$

неперервний у $\bar{\Omega}$ всюди, окрім точки $\mathbf{x} = \mathbf{s}$. Тут $\delta(\mathbf{x}, \mathbf{s})$ – δ -функція Дірака з особливістю у точці $\mathbf{x} = \mathbf{s}$.

Відомо, що за деяких обмежень на область Ω функція Гріна задачі (2.9), (2.10) існуватиме [7, 8]. Вона є симетричною функцією: $G(\mathbf{x}, \mathbf{s}) = G(\mathbf{s}, \mathbf{x})$, причому $G(\mathbf{x}, \mathbf{s}) \geq 0$, якщо $\mathbf{x}, \mathbf{s} \in \bar{\Omega}$, $\mathbf{x} \neq \mathbf{s}$ [8].

Якщо $G(\mathbf{x}, \mathbf{s})$ – функція Гріна задачі (2.9), (2.10), то ця задача еквівалент-

на інтегральному рівнянню Гаммерштейна

$$u(\mathbf{x}) = \int_{\Omega} G(\mathbf{x}, \mathbf{s}) f(\mathbf{s}, u(\mathbf{s})) d\mathbf{s}. \quad (2.11)$$

Рівняння (2.11) розглядатимемо у банаховому просторі $C(\bar{\Omega})$ функцій, неперервних у $\bar{\Omega}$. Норма у $C(\bar{\Omega})$ вводиться рівністю $\|u\| = \max_{\mathbf{x} \in \bar{\Omega}} |u(\mathbf{x})|$. У просторі $C(\bar{\Omega})$ виділимо конус $\mathcal{K}_+ = \{u \in C(\bar{\Omega}) : u(\mathbf{x}) \geq 0, \mathbf{x} \in \bar{\Omega}\}$ невід'ємних функцій. Як вже зазначалося, конус \mathcal{K}_+ у $C(\bar{\Omega})$ є нормальним (і навіть гострим). За допомогою конуса \mathcal{K}_+ у просторі $C(\bar{\Omega})$ введемо напівупорядкованість за правилом:

$$\text{для } u, v \in C(\bar{\Omega}) \text{ } u \leq v, \text{ якщо } v - u \in \mathcal{K}_+,$$

тобто

$$u \leq v, \text{ якщо } u(\mathbf{x}) \leq v(\mathbf{x}) \text{ для всіх } \mathbf{x} \in \bar{\Omega}.$$

Якщо існує класичний розв'язок задачі (2.9), (2.10), тобто такої функції $u^* \in C^2(\Omega) \cap C(\bar{\Omega})$, яка задовольняє рівняння (2.9) і умову (2.10), ця функція також задовольняє і рівняння (2.11). Якщо ж класичного розв'язку немає, то інтегральне рівняння (2.11) можна взяти за основу означення узагальненого розв'язку задачі (2.9), (2.10).

Означення 2.19. Функцію $u^* \in \mathcal{K}_+$ називатимемо розв'язком (узагальненим) крайової задачі (2.9), (2.10), якщо вона є розв'язком інтегрального рівняння (2.11).

З рівнянням (2.11) пов'яжемо нелінійний інтегральний оператор T , що діє у $C(\bar{\Omega})$ за правилом

$$T(u)(\mathbf{x}) = \int_{\Omega} G(\mathbf{x}, \mathbf{s}) f(\mathbf{s}, u(\mathbf{s})) d\mathbf{s}. \quad (2.12)$$

Властивості оператора T вигляду (2.12) викладені у наступній лемі [19].

Лема 2.1. Оператор T вигляду (2.12), де $G(\mathbf{x}, \mathbf{s})$ – функція Гріна задачі (2.9), (2.10), що розглядається у просторі $C(\bar{\Omega})$, напівопорядкованому конусом \mathcal{K}_+ невід’ємних функцій, має такі властивості:

а) є додатним оператором;

б) є u_0 -додатним оператором, де функція $u_0(\mathbf{x})$ визначається рівністю

$$u_0(\mathbf{x}) = \int_{\Omega} G(\mathbf{x}, \mathbf{s}) d\mathbf{s} \quad (2.13)$$

в) є гетеротонним оператором, для якого оператор \hat{T} вигляду

$$\hat{T}(v, w)(\mathbf{x}) = \int_{\Omega} G(\mathbf{x}, \mathbf{s}) \hat{f}(\mathbf{s}, v(\mathbf{s}), w(\mathbf{s})) d\mathbf{s} \quad (2.14)$$

є супровідним, якщо функція $f(\mathbf{x}, u)$ дозволяє діагональне подання $f(\mathbf{x}, u) = \hat{f}(\mathbf{x}, u, u)$, де неперервна за сукупністю змінних \mathbf{x} , v , w функція $\hat{f}(\mathbf{x}, v, w)$ монотонно зростає за v і монотонно спадає за w для всіх $\mathbf{x} \in \Omega$;

г) є псевдоувігнутим і навіть u_0 -псевдоувігнутим оператором, де функція $u_0(\mathbf{x})$ має вигляд (2.13), якщо для будь-яких додатних чисел v , w при будь-якому $\tau \in (0, 1)$ виконується нерівність

$$\hat{f}\left(\mathbf{x}, \tau v, \frac{1}{\tau} w\right) > \tau \hat{f}(\mathbf{x}, v, w), \quad \mathbf{x} \in \Omega. \quad (2.15)$$

Вважатимемо далі, що оператор T вигляду (2.12) є гетеротонним з су-

провідним оператором \hat{T} вигляду (2.14). Зрозуміло, що оператори T і \hat{T} є цілком неперервними. Розглянемо метод двобічних наближень знаходження додатного розв'язку інтегрального рівняння (2.11) (а отже, і додатного розв'язку крайової задачі (2.9), (2.10)).

У конусі \mathcal{K}_+ виділимо сильно інваріантний конусний відрізок $\langle v_0, w_0 \rangle$ умовами (2.3), які для оператора \hat{T} , визначеного рівністю (2.14), приймають вигляд

$$\int_{\Omega} G(\mathbf{x}, \mathbf{s}) \hat{f}(\mathbf{s}, v_0(\mathbf{s}), w_0(\mathbf{s})) d\mathbf{s} \geq v_0(\mathbf{x}) \text{ для всіх } \mathbf{x} \in \bar{\Omega}, \quad (2.16)$$

$$\int_{\Omega} G(\mathbf{x}, \mathbf{s}) \hat{f}(\mathbf{s}, w_0(\mathbf{s}), v_0(\mathbf{s})) d\mathbf{s} \leq w_0(\mathbf{x}) \text{ для всіх } \mathbf{x} \in \bar{\Omega}. \quad (2.17)$$

За схемою (2.5) сформуємо ітераційний процес

$$v^{(k+1)}(\mathbf{x}) = \int_{\Omega} G(\mathbf{x}, \mathbf{s}) \hat{f}(\mathbf{s}, v^{(k)}(\mathbf{s}), w^{(k)}(\mathbf{s})) d\mathbf{s}, \quad k = 0, 1, 2, \dots, \quad (2.18)$$

$$w^{(k+1)}(\mathbf{x}) = \int_{\Omega} G(\mathbf{x}, \mathbf{s}) \hat{f}(\mathbf{s}, w^{(k)}(\mathbf{s}), v^{(k)}(\mathbf{s})) d\mathbf{s}, \quad k = 0, 1, 2, \dots, \quad (2.19)$$

$$v^{(0)}(\mathbf{x}) = v_0(\mathbf{x}), \quad w^{(0)}(\mathbf{x}) = w_0(\mathbf{x}). \quad (2.20)$$

З сильної інваріантності конусного відрізка $\langle v_0, w_0 \rangle$ та гетеротонності оператора T , для якого оператор \hat{T} є супровідним, можна зробити висновок, що послідовність $\{v^{(k)}(\mathbf{x})\}$ не спадає за конусом \mathcal{K}_+ , а послідовність $\{w^{(k)}(\mathbf{x})\}$ не зростає за конусом \mathcal{K}_+ . Крім того, через нормальність конуса \mathcal{K}_+ і повну неперервність оператора \hat{T} існуватимуть границі $v^*(\mathbf{x})$ і $w^*(\mathbf{x})$ цих послідовностей. Отже, справджується ланцюг нерівностей

$$v_0 = v^{(0)} \leq v^{(1)} \leq \dots \leq v^{(k)} \leq \dots \leq v^* \leq w^* \leq \dots \leq w^{(k)} \leq \dots \leq w^{(1)} \leq w^{(0)} = w_0.$$

Можливими є два випадки: $v^* < w^*$ і $v^* = w^*$. У другому випадку $u^* := v^* = w^*$ – єдина на конусному відрізку $\langle v_0, w_0 \rangle$ нерухома точка оператора T , а отже, u^* – єдиний на $\langle v_0, w_0 \rangle$ розв’язок розглядуваної крайової задачі.

Функції $v^*(\mathbf{x})$ і $w^*(\mathbf{x})$ є розв’язком системи рівнянь (2.4), яка у нашому випадку має вигляд:

$$v(\mathbf{x}) = \int_{\Omega} G(\mathbf{x}, \mathbf{s}) \hat{f}(\mathbf{s}, v(\mathbf{s}), w(\mathbf{s})) ds, \quad (2.21)$$

$$w(\mathbf{x}) = \int_{\Omega} G(\mathbf{x}, \mathbf{s}) \hat{f}(\mathbf{s}, w(\mathbf{s}), v(\mathbf{s})) ds. \quad (2.22)$$

Рівність $v^* = w^*$ буде виконана, якщо система (2.21), (2.22) не має на конусному відрізку $\langle v_0, w_0 \rangle$ таких розв’язків, що $v \neq w$.

Отже, справджується така теорема [19, 20].

Теорема 2.7. Нехай $\langle v_0, w_0 \rangle$ – сильно інваріантний конусний відрізок для гетеротонного оператора T вигляду (2.12) з супровідним оператором \hat{T} вигляду (2.14) і система рівнянь (2.21), (2.22) не має на $\langle v_0, w_0 \rangle$ розв’язків таких, що $v \neq w$. Тоді ітераційний процес (2.18) – (2.20) збігається у нормі простору $C(\bar{\Omega})$ до єдиного на $\langle v_0, w_0 \rangle$ неперервного додатного розв’язку u^* крайової задачі (2.9), (2.10), причому має місце ланцюг нерівностей

$$\begin{aligned} v_0 = v^{(0)} &\leq v^{(1)} \leq \dots \leq v^{(k)} \leq \dots \leq u^* \leq \\ &\leq \dots \leq w^{(k)} \leq \dots \leq w^{(1)} \leq w^{(0)} = w_0. \end{aligned} \quad (2.23)$$

Умови існування єдиного додатного розв’язку крайової задачі (2.9), (2.10) та двобічної збіжності до нього послідовних наближень (2.18) – (2.20) можуть бути уточнені за рахунок з’ясування умов, за яких система рівнянь (2.21), (2.22) не має на $\langle v_0, w_0 \rangle$ розв’язків таких, що $v \neq w$.

Спочатку розглянемо умову (2.7). Вона виконуватиметься для гетеротон-

ного оператора T вигляду (2.12) з супровідним оператором \hat{T} вигляду (2.14), якщо для будь-яких чисел v, w, u таких, що $0 < v < w, 0 < u < w$, і для всіх $\mathbf{x} \in \Omega$ має місце нерівність

$$\hat{f}(\mathbf{x}, v + u, w - u) < \hat{f}(\mathbf{x}, v, w) + uM^{-1}, \quad (2.24)$$

де $M = \max_{\mathbf{x} \in \bar{\Omega}} u_0(\mathbf{x})$.

Отже, справджується така теорема [19, 20].

Теорема 2.8. Нехай $\langle v_0, w_0 \rangle$ – сильно інваріантний конусний відрізок для гетеротонного оператора T вигляду (2.12) з супровідним оператором \hat{T} вигляду (2.14) і має місце умова (2.24). Тоді ітераційний процес (2.18) – (2.20) двобічно збігається у нормі простору $C(\bar{\Omega})$ до єдиного на $\langle v_0, w_0 \rangle$ неперервного додатного розв'язку u^* крайової задачі (2.9), (2.10).

Другою умовою, яка забезпечить рівність $v^* = w^*$, є умова (2.8). Припустимо, що існує таке число $L > 0$, що функція $\hat{f}(\mathbf{x}, v, w)$ для всіх чисел v, w таких, що $0 < v, w < M_0$, де $M_0 = \max_{\mathbf{x} \in \bar{\Omega}} w^0(\mathbf{x})$, і для всіх $\mathbf{x} \in \Omega$ задовольняє нерівність

$$\left| \hat{f}(\mathbf{x}, w, v) - \hat{f}(\mathbf{x}, v, w) \right| \leq L|w - v|. \quad (2.25)$$

Тоді

$$\left\| w^{(k+1)} - v^{(k+1)} \right\| = \left\| \hat{T}(w^{(k)}, v^{(k)}) - \hat{T}(v^{(k)}, w^{(k)}) \right\| \leq LM \left\| w^{(k)} - v^{(k)} \right\|,$$

де $M = \max_{\mathbf{x} \in \bar{\Omega}} u_0(\mathbf{x})$, а отже,

$$\left\| w^{(k+1)} - v^{(k+1)} \right\| \leq (LM)^{k+1} \left\| w^{(0)} - v^{(0)} \right\|.$$

Тоді рівність $v^* = w^*$ матиме місце, якщо $\gamma = LM < 1$, і справджуватиметься теорема [19, 20].

Теорема 2.9. Нехай $\langle v_0, w_0 \rangle$ – сильно інваріантний конусний відрізок для гетеротонного оператора T вигляду (2.12) з супровідним оператором \hat{T} вигляду (2.14) і має місце умова (2.25), причому $\gamma = LM < 1$, де $M = \max_{\mathbf{x} \in \bar{\Omega}} u_0(\mathbf{x})$. Тоді ітераційний процес (2.18) – (2.20) двобічно збігається у нормі простору $C(\bar{\Omega})$ до єдиного на $\langle v_0, w_0 \rangle$ неперервного додатного розв'язку u^* крайової задачі (2.9), (2.10).

Ще однією умовою того, що система рівнянь (2.21), (2.22) не має на сильно інваріантному конусному відрізку $\langle v_0, w_0 \rangle$ розв'язків таких, що $v \neq w$, є умова u_0 -псевдоувігнутості гетеротонного оператора T вигляду (2.12) з супровідним оператором \hat{T} вигляду (2.14). Тоді з огляду на твердження г) леми 2.1 приходимо до наступного результату.

Теорема 2.10. Нехай $\langle v_0, w_0 \rangle \subset K(u_0)$ – сильно інваріантний конусний відрізок для гетеротонного оператора T вигляду (2.12) з супровідним оператором \hat{T} вигляду (2.14) і має місце умова (2.15). Тоді ітераційний процес (2.18) – (2.20) двобічно збігається у нормі простору $C(\bar{\Omega})$ до єдиного на $\langle v_0, w_0 \rangle$ неперервного додатного розв'язку u^* крайової задачі (2.9), (2.10).

За наближений розв'язок крайової задачі (2.9), (2.10) на k -й ітерації приймаємо функцію

$$u^{(k)}(\mathbf{x}) = \frac{w^{(k)}(\mathbf{x}) + v^{(k)}(\mathbf{x})}{2}. \quad (2.26)$$

Тоді можна вказати зручну апостеріорну оцінку похибки для наближеного розв'язку (2.26):

$$\|u^* - u^{(k)}\| \leq \frac{1}{2} \max_{\mathbf{x} \in \bar{\Omega}} (w^{(k)}(\mathbf{x}) - v^{(k)}(\mathbf{x})), \quad (2.27)$$

що є перевагою двобічного ітераційного процесу (2.18) – (2.20).

Таким чином, щоб отримати наближений розв'язок крайової задачі (2.9), (2.10) з точністю $\varepsilon > 0$, ітераційний процес слід проводити до виконання нерівності

$$\max_{\mathbf{x} \in \bar{\Omega}} (w^{(k)}(\mathbf{x}) - v^{(k)}(\mathbf{x})) < 2\varepsilon.$$

З цих умов з точністю ε можна вважати, що $u^*(\mathbf{x}) \approx u^{(k)}(\mathbf{x})$.

Недоліком описаного методу двобічних наближень є те, що для його практичної реалізації потрібно знайти явний вигляд функції Гріна, що обмежує його практичну застосовність лише деякими класичними областями. Проте у випадку некласичних областей метод теж може мати цінність як метод доведення існування єдиного додатного розв'язку розглядуваної крайової задачі.

При практичній реалізації методу двобічних наближень на основі використання методу функцій Гріна певною проблемою може бути також побудова сильно інваріантного конусного відрізка $\langle v_0, w_0 \rangle$, який задає початкові наближення. Розглянемо деякі загальні рекомендації щодо його побудови [18].

Є три можливості поведінки функції $f(\mathbf{x}, u)$, якщо $u = 0$: $f(\mathbf{x}, 0) > 0$ для всіх $\mathbf{x} \in \Omega$, $f(\mathbf{x}, 0) = 0$ для всіх $\mathbf{x} \in \Omega$ і $f(\mathbf{x}, u)$ невизначена при $u = 0$.

Якщо $f(\mathbf{x}, 0) > 0$ для всіх $\mathbf{x} \in \Omega$, то цю властивість матиме також функція $\hat{f}(\mathbf{x}, v, w)$, тобто $\hat{f}(\mathbf{x}, 0, w) > 0$ при $w > 0$ і $\hat{f}(\mathbf{x}, v, 0) > 0$ при $v > 0$. Тоді кінці сильно інваріантного конусного відрізка $\langle v_0, w_0 \rangle$ можна шукати у вигляді $v^0 = 0$, $w^0 = \beta > 0$ і нерівності (2.16), (2.17) набувають вигляду

$$\int_{\Omega} G(\mathbf{x}, \mathbf{s}) \hat{f}(\mathbf{s}, 0, \beta) d\mathbf{s} \geq 0 \text{ для всіх } \mathbf{x} \in \bar{\Omega},$$

$$\int_{\Omega} G(\mathbf{x}, \mathbf{s}) \hat{f}(\mathbf{s}, \beta, 0) d\mathbf{s} \leq \beta \text{ для всіх } \mathbf{x} \in \bar{\Omega}.$$

Перша з цих нерівностей виконується для будь-якого $\beta > 0$, а другу можна замінити нерівністю

$$u_0(\mathbf{x}) \leq \frac{\beta}{\max_{\mathbf{s} \in \bar{\Omega}} \hat{f}(\mathbf{s}, \beta, 0)} \text{ для всіх } \mathbf{x} \in \bar{\Omega}.$$

Тоді, якщо $M = \max_{\mathbf{x} \in \bar{\Omega}} u_0(\mathbf{x})$, для визначення β отримаємо незалежну від \mathbf{x} нерівність

$$M \leq \frac{\beta}{\max_{\mathbf{s} \in \bar{\Omega}} \hat{f}(\mathbf{s}, \beta, 0)}. \quad (2.28)$$

Отже, якщо нерівність (2.28) має розв'язок $\beta > 0$, то конусний відрізок $\langle 0, \beta \rangle$ є сильно інваріантним для гетеротонного оператора T вигляду (2.12) з супровідним оператором \hat{T} вигляду (2.14).

Для більш швидкої збіжності ітерацій величина $\max_{\mathbf{x} \in \bar{\Omega}} (w_0(\mathbf{x}) - v_0(\mathbf{x})) = \beta$ має бути якомога меншою, тому при практичній реалізації ітераційного процесу (2.18) – (2.20) слід взяти найменше β , що задовольняє нерівність (2.28).

Якщо ж $f(\mathbf{x}, 0) = 0$ для всіх $\mathbf{x} \in \Omega$, то $\hat{f}(\mathbf{x}, 0, 0) = 0$, $\mathbf{x} \in \Omega$, і $\hat{f}(\mathbf{x}, 0, w) = 0$ при $w > 0$. Отже, при виборі $v_0(\mathbf{x}) = 0$ ми отримуємо, що $v^{(k)}(\mathbf{x}) = 0$ для всіх $k = 1, 2, \dots$, що робить неможливим побуду послідовності нижніх наближень $\{v^{(k)}(x)\}$. У випадку, коли $f(\mathbf{x}, u)$ невизначена при $u = 0$, вибір $v_0(\mathbf{x}) = 0$ взагалі є неможливим. У цьому випадку можна скористатися таким прийомом. Нехай функція $\omega(\mathbf{x})$ така, що:

- а) $\omega(\mathbf{x}) > 0$ у Ω ;
- б) $\omega(\mathbf{x}) = 0$ на $\partial\Omega$;
- в) $|\nabla\omega(\mathbf{x})| \neq 0$ на $\partial\Omega$.

Оскільки шуканий розв'язок крайової задачі (2.9), (2.10) задовольняє однорідну умову Діріхле, то кінці сильно інваріантного конусного відрізка можна шукати у вигляді $v_0(\mathbf{x}) = \alpha\omega(\mathbf{x})$, $w_0(\mathbf{x}) = \beta\omega(\mathbf{x})$, де $0 < \alpha < \beta$. Тоді нерівності (2.16), (2.17) набудуть вигляду

$$\int_{\Omega} G(\mathbf{x}, \mathbf{s}) \hat{f}(\mathbf{s}, \alpha\omega(\mathbf{s}), \beta\omega(\mathbf{s})) ds \geq \alpha\omega(\mathbf{x}) \text{ для всіх } \mathbf{x} \in \bar{\Omega},$$

$$\int_{\Omega} G(\mathbf{x}, \mathbf{s}) \hat{f}(\mathbf{s}, \beta\omega(\mathbf{s}), \alpha\omega(\mathbf{s})) ds \leq \beta\omega(\mathbf{x}) \text{ для всіх } \mathbf{x} \in \bar{\Omega}.$$

Ці нерівності можна звести до вигляду

$$\alpha \leq \min_{\mathbf{x} \in \bar{\Omega}} h_1(\mathbf{x}; \alpha, \beta), \quad \beta \geq \max_{\mathbf{x} \in \bar{\Omega}} h_2(\mathbf{x}; \alpha, \beta), \quad (2.29)$$

де

$$h_1(\mathbf{x}; \alpha, \beta) = \int_{\Omega} \frac{G(\mathbf{x}, \mathbf{s})}{\omega(\mathbf{x})} \hat{f}(\mathbf{s}, \alpha\omega(\mathbf{s}), \beta\omega(\mathbf{s})) ds,$$

$$h_2(\mathbf{x}; \alpha, \beta) = \int_{\Omega} \frac{G(\mathbf{x}, \mathbf{s})}{\omega(\mathbf{x})} \hat{f}(\mathbf{s}, \beta\omega(\mathbf{s}), \alpha\omega(\mathbf{s})) ds.$$

Для більш швидкої збіжності ітерацій величина

$$\max_{\mathbf{x} \in \bar{\Omega}} (w_0(\mathbf{x}) - v_0(\mathbf{x})) = (\beta - \alpha) \max_{\mathbf{x} \in \bar{\Omega}} \omega(\mathbf{x})$$

має бути якомога меншою, а отже, при практичній реалізації ітераційного процесу (2.18) – (2.20) слід взяти найбільше α і найменше β , що задовольняють нерівності (2.29).

2.4 Дослідження методом двобічних наближень на основі використання функції Гріна нелінійної еліптичної крайової задачі, що є математичною моделлю термохімічного процесу

У скінченному вимірному компактi $\bar{\Omega} \subset \mathbb{R}^n$ розглянемо нелінійну еліптичну крайову задачу

$$-\Delta u = \lambda e^{\frac{u}{1+\alpha u}}, \mathbf{x} \in \Omega, \quad (2.30)$$

$$u(\mathbf{x}) > 0, \mathbf{x} \in \Omega, \quad (2.31)$$

$$u(\mathbf{x}) = 0, \mathbf{x} \in \partial\Omega. \quad (2.32)$$

де $\lambda > 0$, $\alpha > 0$ – числові параметри.

Крайова задача (2.30) – (2.32) є математичною моделлю термохімічного процесу, що протікає в області Ω .

Якщо $G(\mathbf{x}, \mathbf{s})$ – функція Гріна першої крайової задачі для оператора Лапласа Δ в області Ω , то крайова задача (2.30) – (2.32) еквівалентна інтегральному рівнянню Гаммерштейна

$$u(\mathbf{x}) = \lambda \int_{\Omega} G(\mathbf{x}, \mathbf{s}) e^{\frac{u(\mathbf{s})}{1+\alpha u(\mathbf{s})}} d\mathbf{s}. \quad (2.33)$$

Нелінійне інтегральне рівняння (2.33) розглядатимемо у просторі $C(\bar{\Omega})$. Це банахів простір функцій, неперервних на множині $\bar{\Omega}$, з нормою, яка задається рівністю $\|u\| = \max_{\mathbf{x} \in \bar{\Omega}} |u(\mathbf{x})|$. У просторі $C(\bar{\Omega})$ розглянемо конус невід’ємних функцій $\mathcal{K}_+ = \{u \in C(\bar{\Omega}) : u(\mathbf{x}) \geq 0, \mathbf{x} \in \bar{\Omega}\}$. Цей конус є нормальним (і навіть гострим). Введемо у просторі $C(\bar{\Omega})$ за допомогою конуса \mathcal{K}_+ напівупорядкованість за правилом: для $u, v \in C(\bar{\Omega})$

$$u \leq v, \text{ якщо } v - u \in \mathcal{K}_+,$$

тобто

$$u \leq v, \text{ якщо } u(\mathbf{x}) \leq v(\mathbf{x}) \text{ для всіх } \mathbf{x} \in \bar{\Omega}.$$

Функцію $u^* \in \mathcal{K}_+$, яка є розв'язком інтегрального рівняння (2.33) називатимемо розв'язком (узагальненим) крайової задачі (2.30) – (2.32).

З інтегральним рівнянням (2.33) пов'яжемо нелінійний інтегральний оператор T , який діє у просторі $C(\bar{\Omega})$ за правилом

$$T(u)(\mathbf{x}) = \lambda \int_{\Omega} G(\mathbf{x}, \mathbf{s}) e^{\frac{u(\mathbf{s})}{1+\alpha u(\mathbf{s})}} ds. \quad (2.34)$$

Функція $f(u) = \lambda e^{\frac{u}{1+\alpha u}}$ є неперервною і додатною при $\mathbf{x} \in \bar{\Omega}$, $u > 0$, і може бути діагонально подана за допомогою функції $\hat{f}(v, w) = \lambda e^{\frac{v}{1+\alpha w}}$, яка монотонно зростає за v і монотонно спадає за w , оскільки $f'_v(v, w) = \frac{\lambda}{1 + \alpha w} e^{\frac{v}{1+\alpha w}} > 0$ і $f'_w(v, w) = -\frac{\lambda \alpha v}{(1 + \alpha w)^2} e^{\frac{v}{1+\alpha w}} < 0$ при $v > 0$, $w > 0$.

Тоді інтегральний оператор вигляду (2.34) буде гетеротонним оператором, для якого супровідним оператором \hat{T} буде оператор вигляду

$$\hat{T}(v, w)(\mathbf{x}) = \lambda \int_{\Omega} G(\mathbf{x}, \mathbf{s}) e^{\frac{v(\mathbf{s})}{1+\alpha w(\mathbf{s})}} ds. \quad (2.35)$$

З огляду на лему 2.1 оператор T вигляду (2.34) буде також додатним та, навіть, u_0 -додатним оператором, де функція $u_0(\mathbf{x})$ визначається рівністю (2.13).

Далі для оператора T побудуємо сильно інваріантний конусний відрізок. Оскільки $f(0) = \lambda > 0$, то шукатимемо цей відрізок у вигляді $\langle v_0, w_0 \rangle = \langle 0, \beta \rangle$, де $\beta > 0$. Тоді умови (2.16), (2.17), які виділяють $\langle v_0, w_0 \rangle$ набувають вигляду

$$\lambda \int_{\Omega} G(\mathbf{x}, \mathbf{s}) ds \geq 0 \text{ для всіх } \mathbf{x} \in \bar{\Omega}, \quad (2.36)$$

$$\lambda e^{\beta} \int_{\Omega} G(\mathbf{x}, \mathbf{s}) ds \leq \beta \text{ для всіх } \mathbf{x} \in \bar{\Omega}. \quad (2.37)$$

Через невід'ємність функції Гріна першої крайової задачі для оператора Лапласа нерівність (2.36) завжди виконуватиметься, а нерівність (2.37) можна записати у вигляді

$$\lambda M \leq \beta e^{-\beta}, \quad (2.38)$$

де $M = \max_{\mathbf{x} \in \bar{\Omega}} \int_{\Omega} G(\mathbf{x}, \mathbf{s}) ds$.

Функція $g(\beta) = \beta e^{-\beta}$ приймає додатні значення при $\beta > 0$, $g(0) = 0$, $\lim_{\beta \rightarrow +\infty} g(\beta) = 0$, $\max_{\beta > 0} g(\beta) = g(1) = \frac{1}{e}$. Це означає, що нерівність (2.38) матиме розв'язок для будь-яких $\alpha > 0$ і таких λ , що задовольняють нерівність $\lambda < \frac{1}{Me}$. Тоді для гетеротонного оператора вигляду (2.34) сильно інваріантний конус відрізок існуватиме для будь-яких $\alpha > 0$ і $0 < \lambda < \frac{1}{Me}$. Оскільки для більш швидкої збіжності двобічних наближень потрібно взяти якомога менше значення β , то за β слід обрати найменший корінь рівняння $\beta e^{-\beta} = \lambda M$.

Отже, для гетеротонного оператора вигляду (2.34) сильно інваріантний конусний відрізок матиме вигляд $\langle v_0, w_0 \rangle = \langle 0, \beta \rangle$, де β – розв'язок рів-

няння $\beta e^{-\beta} = \lambda M$. При цьому завжди $\beta < 1$.

Сформуємо ітераційний процес за схемою

$$v^{(k+1)}(\mathbf{x}) = \lambda \int_{\Omega} G(\mathbf{x}, \mathbf{s}) e^{\frac{v^{(k)}(\mathbf{s})}{1+\alpha w^{(k)}(\mathbf{s})}} d\mathbf{s}, \quad k = 0, 1, 2, \dots, \quad (2.39)$$

$$w^{(k+1)}(\mathbf{x}) = \lambda \int_{\Omega} G(\mathbf{x}, \mathbf{s}) e^{\frac{w^{(k)}(\mathbf{s})}{1+\alpha v^{(k)}(\mathbf{s})}} d\mathbf{s}, \quad k = 0, 1, 2, \dots, \quad (2.40)$$

$$v^{(0)}(\mathbf{x}) = 0, \quad w^{(0)}(\mathbf{x}) = \beta. \quad (2.41)$$

З'ясуємо умови, за виконання яких ітераційний процес (2.39) – (2.41) двобічно збігатиметься до єдиного на $\langle 0, \beta \rangle$ узагальненого розв'язку задачі (2.30) – (2.32).

Оскільки

$$\left| \hat{f}(v, w) - \hat{f}(w, v) \right| = \lambda \left| e^{\frac{v}{1+\alpha w}} - e^{\frac{w}{1+\alpha v}} \right| \leq L |v - w|,$$

де $L = \lambda \sup_{0 < u < \beta} \frac{1 + 2\alpha u}{(1 + \alpha u)} e^{\frac{u}{1+\alpha u}}$, то відповідно до теореми 2.9 ітераційний процес

(2.39) – (2.41) двобічно збігатиметься до єдиного на $\langle 0, \beta \rangle$ узагальненого розв'язку задачі (2.30) – (2.32), якщо $\gamma = LM < 1$.

Дослідимо тепер оператор T вигляду (2.34) на u_0 -псевдоувігнутість. Для

нашої функції $\hat{f}(v, w)$ умова (2.15) набуває вигляду $\lambda e^{\frac{\tau v}{1+\frac{\alpha}{\tau} w}} > \tau \lambda e^{\frac{v}{1+\alpha w}}$, або

$$e^{\frac{\tau^2 v}{\tau + \alpha w}} > \tau e^{\frac{v}{1+\alpha w}}. \quad (2.42)$$

Якщо нерівність (2.42) виконуватиметься для всіх $\tau \in (0, 1)$ і

$0 < v, w < \beta$, то це, відповідно до теореми 2.10, теж гарантує двобічну збіжність ітераційного процесу (2.39) – (2.41) до єдиного на $\langle 0, \beta \rangle$ узагальненого розв'язку задачі (2.30) – (2.32).

Після логарифмування та зведення до спільного знаменника нерівність (2.42) набуде вигляду

$$(\tau - 1) \frac{[\tau + \alpha(\tau + 1)w]v}{(\tau + \alpha w)(1 + \alpha w)} > \ln \tau.$$

Оскільки $\tau \in (0, 1)$, а $0 < v, w < \beta$, то остання нерівність виконуватиметься, якщо $\beta < 1$.

Отже, мають місце наступні твердження.

Лема 2.2. Оператор T , що діє у просторі $C(\bar{\Omega})$ за правилом (2.34):

а) є додатним і навіть u_0 -додатним оператором, де функція $u_0(\mathbf{x})$ визначається рівністю (2.13);

б) є гетеротонним оператором, для якого супровідний оператор \hat{T} діє з $C(\bar{\Omega}) \times C(\bar{\Omega})$ у $C(\bar{\Omega})$ за правилом (2.35);

в) має сильно інваріантний конусний відрізок $\langle 0, \beta \rangle$, де β визначається нерівністю (2.38), якщо $0 < \lambda < \frac{1}{Me}$, $M = \max_{\mathbf{x} \in \bar{\Omega}} u_0(\mathbf{x})$;

г) є псевдоувігнутим і навіть u_0 -псевдоувігнутим оператором на сильно інваріантному конусному відрізку $\langle 0, \beta \rangle$, якщо $\beta < 1$.

Теорема 2.11. Нехай $\alpha > 0$, $0 < \lambda < \frac{1}{Me}$ і β – найменший корінь рівняння $\beta e^{-\beta} = \lambda M$, де $M = \max_{\mathbf{x} \in \bar{\Omega}} \int_{\Omega} G(\mathbf{x}, \mathbf{s}) ds$. Тоді ітераційний процес (2.39) – (2.41) двобічно збігається до єдиного на $\langle 0, \beta \rangle$ узагальненого розв'язку $u^*(\mathbf{x})$ крайової задачі (2.30) – (2.32).

3 ПРОГРАМНА РЕАЛІЗАЦІЯ

3.1 Система комп'ютерної алгебри Mathematica 12

Більшість систем комп'ютерної алгебри, що використовуються для розв'язання задач прикладної математики, призначені для виконання чисельних обчислень. Їх результат завжди конкретний: це число чи потік чисел, поданий у вигляді таблиці, матриці чи графічної точки. Зазвичай, через основні обмеження комп'ютерної бітової сітки, операції над числами будуть округлені. Реалізація більшості чисельних методів, наприклад, методу розв'язання нелінійних диференціальних рівнянь, також базується на реалізації наближених розрахунків. Зазвичай ці методи призводять до неточних або неправильних розв'язків через накопичення помилок.

Довгий час обмеженість функцій ПК не дозволяла їм реалізувати серйозні символічні математичні системи. Лише на початку 1990-х років ситуація значно покращилася. Значно зросли апаратні можливості ПК, за кордоном була проведена велика робота зі створення системи комп'ютерної алгебри – так званої символічної математичної системи. Найпопулярніші символічні математичні системи поділяються на чотири категорії: MuLisp, мова штучного інтелекту, невелика система Derive, одна з найпотужніших і все ще привабливих систем Maple V, і система Mathematica. Система Mathematica 12 є однією з найбільших потужних символічних математичних систем. Програмний пакет має потужні графічні функції, забезпечуючи документи у вигляді блокнота, який поєднує програми та команди з даними, представленими у формулах, тексті, таблицях та графіках [25].

Система забезпечує динамічні зв'язки між комірками документа у вигляді електронних таблиць при розв'язанні багатьох символічних задач, що принципово і вигідно відрізняє її від інших систем. З точки зору мови програмування, система Mathematica відноситься до системи інтерпретації, тобто аналізує (інтерпретує) кожен вираз послідовно і виконує його негайно. Робота системи

здійснюється в режимі діалогу. Система містить достатній набір керуючих структур для створення умовних виразів, розгалужень у програмі, циклів тощо. Для чисельного розв'язання задачі (2.30) – (2.32), проаналізувавши можливості різних середовищ програмування та математичних пакетів, нами було обрано пакет Mathematica 12, оскільки цей пакет найбільш придатний для теоретичного та чисельного аналізу, особливо для математичного моделювання термохімічних процесів.

3.2 Алгоритм розв'язання задачі дослідження термохімічних процесів

З огляду на результати п. 2.4 застосування методу двобічних наближень на основі використання функції Гріна до розв'язання задачі (2.30) – (2.32) складається з наступних кроків.

Крок 1. Побудувати функцію Гріна $G(\mathbf{x}, \mathbf{s})$ першої крайової задачі для оператора Лапласа в області Ω і знайти $M = \max_{\mathbf{x} \in \bar{\Omega}} \int_{\Omega} G(\mathbf{x}, \mathbf{s}) d\mathbf{s}$.

Крок 2. Задати числові значення параметрів λ , α ($\lambda > 0$, $\alpha > 0$) і перевірити виконання умови $\lambda < \frac{1}{Me}$.

Крок 3. Побудувати сильно інваріантний конусний відрізок $\langle 0, \beta \rangle$, де β – найменший корінь рівняння $\beta e^{-\beta} = \lambda M$.

Крок 4. Задати точність $\varepsilon > 0$ та будувати за формулами

$$v^{(k+1)}(\mathbf{x}) = \lambda \int_{\Omega} G(\mathbf{x}, \mathbf{s}) e^{\frac{v^{(k)}(\mathbf{s})}{1+\alpha w^{(k)}(\mathbf{s})}} d\mathbf{s}, \quad k = 0, 1, 2, \dots,$$

$$w^{(k+1)}(\mathbf{x}) = \lambda \int_{\Omega} G(\mathbf{x}, \mathbf{s}) e^{\frac{w^{(k)}(\mathbf{s})}{1+\alpha v^{(k)}(\mathbf{s})}} d\mathbf{s}, \quad k = 0, 1, 2, \dots,$$

$$v^{(0)}(\mathbf{x}) = 0, \quad w^{(0)}(\mathbf{x}) = \beta,$$

послідовності нижніх $\{v^{(k)}(x)\}$ та верхніх $\{w^{(k)}(x)\}$ наближень до виконання нерівності

$$\max_{\mathbf{x} \in \Omega} (w^{(k)}(\mathbf{x}) - v^{(k)}(\mathbf{x})) < 2\varepsilon.$$

Крок 5. Записати наближений (з точністю ε) розв'язок задачі (2.30) – (2.32) за формулою

$$u^{(k)}(x) = \frac{v^{(k)}(x) + w^{(k)}(x)}{2}.$$

3.3 Опис програми

Програма виконана в математичному пакеті Mathematica 12.0, що дозволяє створювати програмні продукти у вигляді електронних документів.

Перший блок «Налаштування параметрів розрахунку» містить задану функцію Гріна, параметри методу, параметр λ та знайдений параметр β .

Другий блок «Метод» містить ітераційний цикл, який створює двосторонній метод апроксимації.

У останньому блоці «Результат» відображаються числові результати та графічні результати, отримані в третьому блоці: верхня і нижня послідовності наближень і наближений розв'язок задачі.

Код програми наведено в додатку А.

4 РЕЗУЛЬТАТИ ОБЧИСЛЮВАЛЬНОГО ЕКСПЕРИМЕНТУ ТА ЇХ АНАЛІЗ

Обчислювальний експеримент для задачі

$$-\Delta u = \lambda e^{\frac{u}{1+\alpha u}}, \mathbf{x} \in \Omega, \quad (4.1)$$

$$u(\mathbf{x}) > 0, \mathbf{x} \in \Omega, \quad (4.2)$$

$$u(\mathbf{x}) = 0, \mathbf{x} \in \partial\Omega, \quad (4.3)$$

було проведено в трьох областях:

- круг радіуса $R = 1$;
- півкруг радіуса $R = \sqrt{2}$;
- квадрат зі стороною $a = \sqrt{\pi}$.

Вибір геометричних параметрів цих областей зумовлений тим, щоб всі області мали однакову міру: $\mu(\Omega) = \pi$. У всіх експериментах обрано $\alpha = 1$.

Для круга радіуса R функція Гріна має вигляд

$$G(r, \varphi, \rho, \psi) = \frac{1}{4\pi} \ln \frac{r^2 \rho^2 - 2R^2 r \rho \cos(\varphi - \psi) + R^4}{R^2 [r^2 - 2r \rho \cos(\varphi - \psi) + \rho^2]},$$

де декартові координати точок $\mathbf{x} = (x_1, x_2)$, $\mathbf{s} = (s_1, s_2)$ пов'язані з відповідними полярними координатами рівностями $x_1 = r \cos \varphi$, $x_2 = r \sin \varphi$, $s_1 = \rho \cos \psi$, $s_2 = \rho \sin \psi$.

Було знайдено, що $M = \frac{1}{4}$ для круга радіуса $R = 1$, а отже, єдиний додатний розв'язок задачі (4.1) – (4.3) існуватиме і може бути знайдений з двобічними наближеннями при будь-яких $\alpha > 0$ і $0 < \lambda < \lambda_{\max} = \frac{1}{Me} \approx 1,4715$.

Для круга радіуса $R = 1$ при значенні параметра $\lambda = 1$ збіжність з точні-

стю 10^{-4} було досягнуто за п'ять ітерацій. На рис. 4.1 наведено графіки верхніх $w^{(k)}(\mathbf{x})$ та нижніх $v^{(k)}(\mathbf{x})$ наближень, $k = 0, 1, 2, 3, 4, 5$, у перерізі $x_2 = 0$.

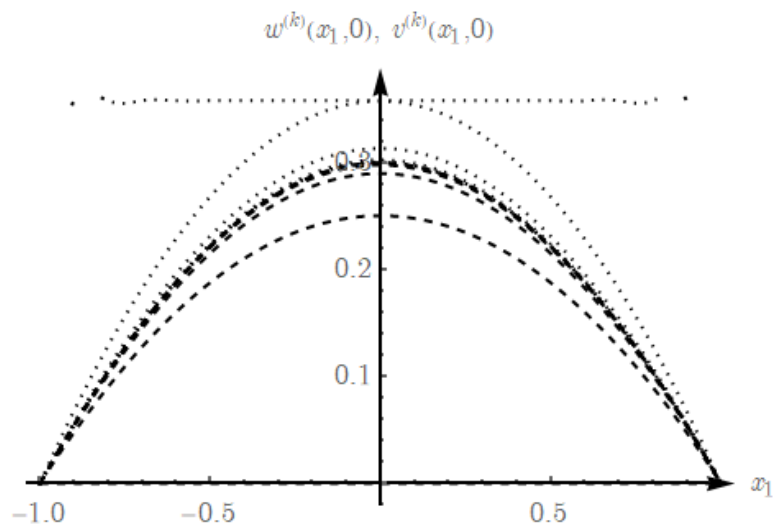


Рисунок 4.1 – Графіки $w^{(k)}(\mathbf{x})$ і $v^{(k)}(\mathbf{x})$, $k = \overline{0, 5}$, у перерізі $x_2 = 0$ для круга радіуса $R = 1$

На рис. 4.2 наведено графік ліній рівня, а на рис. 4.3 наведено графік поверхні наближеного розв'язку $u^{(5)}(\mathbf{x}) = \frac{v^{(5)}(\mathbf{x}) + w^{(5)}(\mathbf{x})}{2}$.

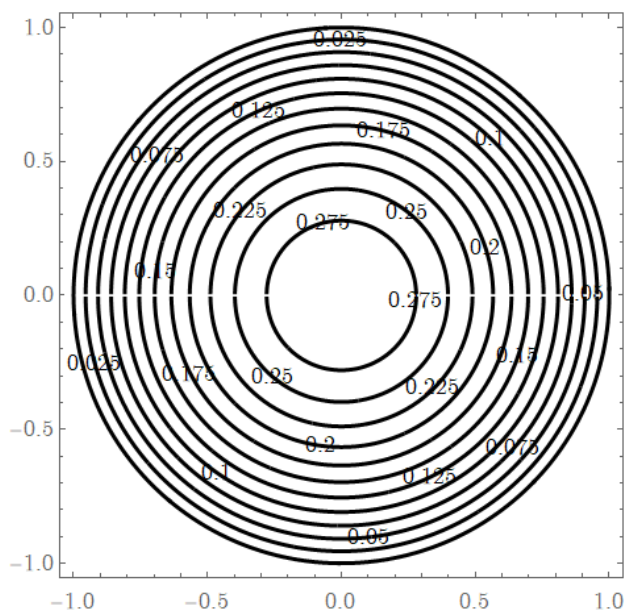


Рисунок 4.2 – Лінії рівня наближеного розв'язку $u^{(5)}(\mathbf{x})$ для круга радіуса $R = 1$

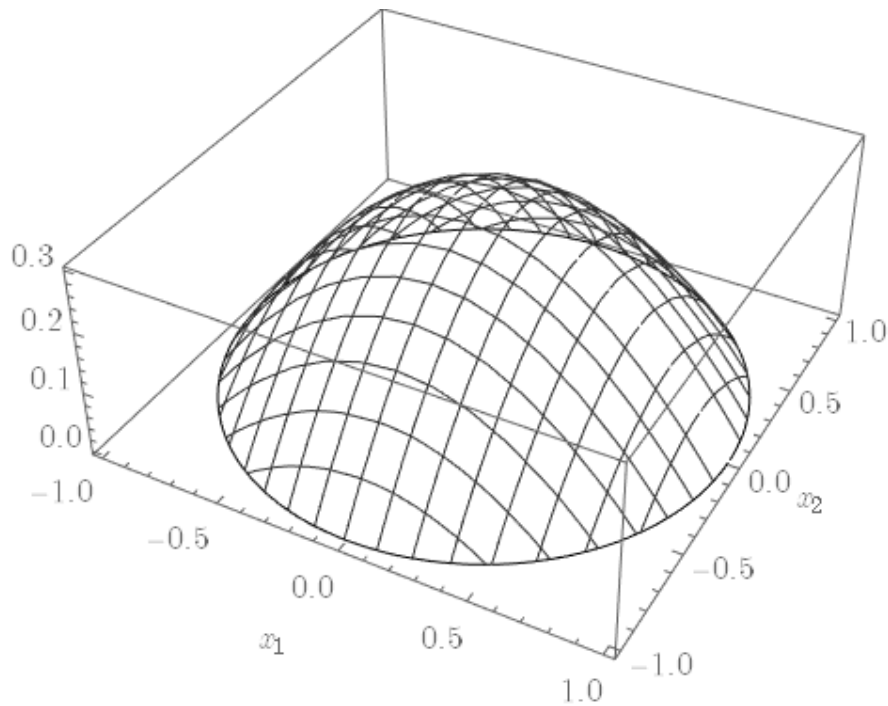


Рисунок 4.3 – Поверхня наближеного розв’язку $u^{(5)}(\mathbf{x})$ для круга радіуса $R = 1$

У табл. 4.1 наведено значення оцінки похибки ε_k для двобічного ітераційного процесу, $k = 0, 1, 2, 3, 4, 5$.

Таблиця 4.1 – Значення оцінки похибки ε_k для ітераційного процесу (2.41) – (2.43) розв’язання задачі (4.1) – (4.3) при $\lambda = 1$ у крузі радіуса $R = 1$

k	0	1	2	3	4	5
ε_k	$0,36 \cdot 10^0$	$0,53 \cdot 10^{-1}$	$0,11 \cdot 10^{-1}$	$0,24 \cdot 10^{-2}$	$0,49 \cdot 10^{-3}$	$0,98 \cdot 10^{-4}$

Аналіз даних таблиці 4.1 показує, що ітерації збігаються зі швидкістю геометричної прогресії зі знаменником, який приблизно дорівнює 0,205.

Також було проведено дослідження залежності розв’язку задачі (4.1) – (4.3) від параметра λ . У таблиці 4.2 наведено дані про значення λ , β , кількість зроблених ітерацій N та норму наближеного розв’язку $\|u^{(N)}\| = \max_{\mathbf{x} \in \Omega} u^{(N)}(\mathbf{x})$.

Таблиця 4.2 – Данні про значення λ , β , кількість зроблених ітерацій N та норму наближеного розв'язку $\|u^{(N)}\|$ для задачі (4.1) – (4.3) у крузі радіуса $R = 1$

λ	β	N	$\ u^{(N)}\ $
0,25	0,06681	3	0,06547
0,50	0,14442	3	0,13709
0,75	0,23784	4	0,21505
1,00	0,35740	5	0,29945
1,25	0,53195	7	0,39023
1,47	0,95525	8	0,47532

Як бачимо з таблиці 4.2 зі зростанням λ збільшуються кількість ітерацій і норма розв'язку, а значення β наближається до одиниці.

Для півкруга радіуса R функція Гріна має вигляд

$$G(r, \varphi, \rho, \psi) = \frac{1}{4\pi} \ln \frac{r^2 \rho^2 - 2R^2 r \rho \cos(\varphi - \psi) + R^4}{R^2 [r^2 - 2r \rho \cos(\varphi - \psi) + \rho^2]} - \frac{1}{4\pi} \ln \frac{r^2 \rho^2 - 2R^2 r \rho \cos(\varphi + \psi) + R^4}{R^2 [r^2 - 2r \rho \cos(\varphi + \psi) + \rho^2]},$$

де декартові координати точок $\mathbf{x} = (x_1, x_2)$, $\mathbf{s} = (s_1, s_2)$ пов'язані з відповідними полярними координатами рівностями $x_1 = r \cos \varphi$, $x_2 = r \sin \varphi$, $s_1 = \rho \cos \psi$, $s_2 = \rho \sin \psi$.

Було знайдено, що $M = 0,195237\dots$ для півкруга радіуса $R = \sqrt{2}$, а отже, єдиний додатний розв'язок задачі (4.1) – (4.3) існуватиме і може бути знайдений з двобічними наближеннями при будь-яких $\alpha > 0$ і

$$0 < \lambda < \lambda_{\max} = \frac{1}{Me} \approx 1,8843.$$

Для півкруга радіуса $R = \sqrt{2}$ при значенні параметра $\lambda = 1$ збіжність з точністю 10^{-4} було досягнуто за п'ять ітерацій. На рис. 4.4 наведено графіки верхніх $w^{(k)}(\mathbf{x})$ та нижніх $v^{(k)}(\mathbf{x})$ наближень, $k = 0, 1, 2, 3, 4, 5$, у перерізі $x_1 = 0$.

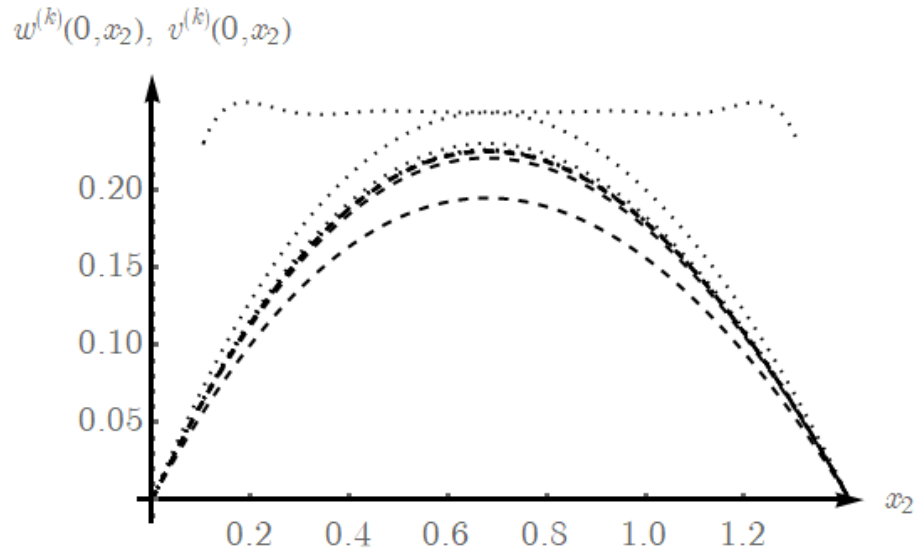


Рисунок 4.4 – Графіки $w^{(k)}(\mathbf{x})$ і $v^{(k)}(\mathbf{x})$, $k = \overline{0,5}$, у перерізі $x_1 = 0$ для круга радіуса $R = \sqrt{2}$

На рис. 4.3 наведено графік ліній рівня, а на рис. 4.4 наведено графік поверхні наближеного розв'язку $u^{(5)}(\mathbf{x}) = \frac{v^{(5)}(\mathbf{x}) + w^{(5)}(\mathbf{x})}{2}$.

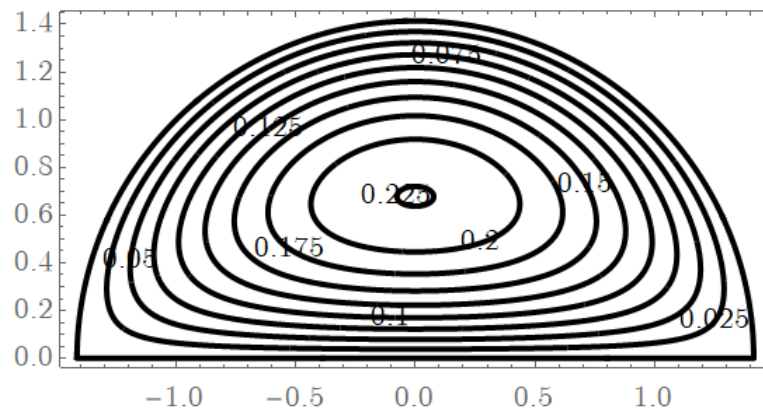


Рисунок 4.5 – Лінії рівня наближеного розв'язку $u^{(5)}(\mathbf{x})$ для півкруга радіуса $R = \sqrt{2}$

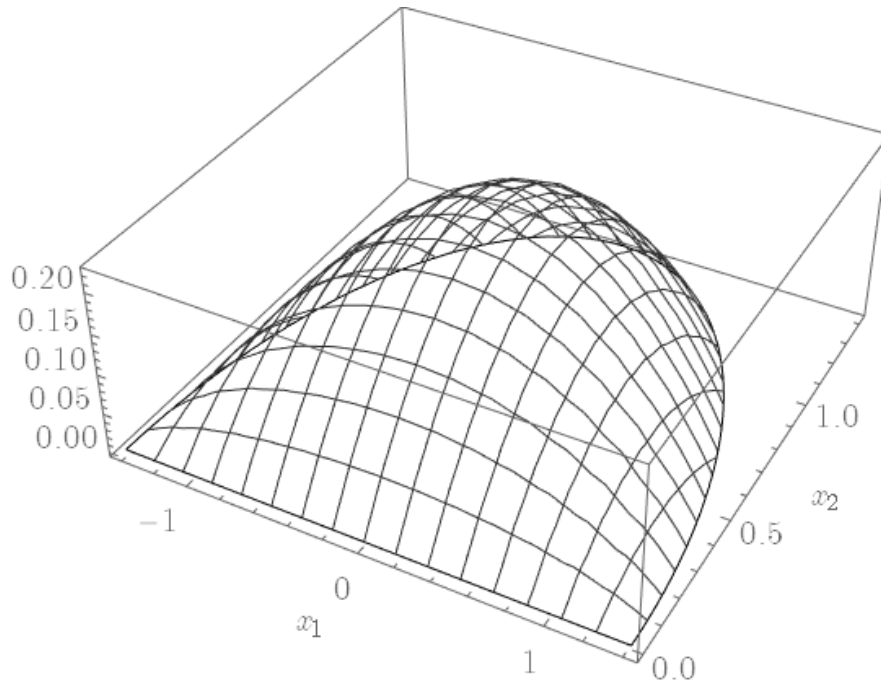


Рисунок 4.6 – Поверхня наближеного розв’язку $u^{(5)}(\mathbf{x})$
для півкруга радіуса $R = \sqrt{2}$

У табл. 4.3 наведено значення оцінки похибки ε_k для двобічного ітераційного процесу, $k = 0, 1, 2, 3, 4, 5$.

Таблиця 4.3 – Значення оцінки похибки ε_k для ітераційного процесу
(2.41) – (2.43) розв’язання задачі (4.1) – (4.3) при $\lambda = 1$
у півкрузі радіуса $R = \sqrt{2}$

k	0	1	2	3	4	5
ε_k	$0,25 \cdot 10^0$	$0,28 \cdot 10^{-1}$	$0,47 \cdot 10^{-2}$	$0,74 \cdot 10^{-3}$	$0,12 \cdot 10^{-3}$	$0,18 \cdot 10^{-4}$

Аналіз даних таблиці 4.3 показує, що ітерації збігаються зі швидкістю геометричної прогресії зі знаменником, який приблизно дорівнює 0,159.

Також досліджено залежність розв’язку задачі (4.1) – (4.3) від параметра λ . У таблиці 4.4 наведено дані про значення λ , β , кількість зроблених ітерацій N та норму наближеного розв’язку $\|u^{(N)}\| = \max_{\mathbf{x} \in \bar{\Omega}} u^{(N)}(\mathbf{x})$.

Таблиця 4.4 – Данні про значення λ , β , кількість зроблених ітерацій N та норму наближеного розв’язку $\|u^{(N)}\|$ для задачі (4.1) – (4.3) у півкрузі радіуса $R = \sqrt{2}$

λ	β	N	$\ u^{(N)}\ $
0,25	0,05138	2	0,05064
0,50	0,10884	3	0,10515
0,75	0,17431	4	0,16346
1,00	0,25092	5	0,22581
1,25	0,34437	5	0,29216
1,50	0,46731	6	0,36252
1,75	0,66310	8	0,43681
1,88	0,93410	8	0,47698

Як бачимо з таблиці 4.4 зі зростанням λ збільшуються кількість ітерацій і норма розв’язку, а значення β наближається до одиниці.

Для квадрата зі стороною a функція Гріна має вигляд

$$G(x_1, x_2, s_2, s_2) = \frac{4}{\pi^2} \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{\sin \frac{\pi n x_1}{a} \sin \frac{\pi m x_2}{a} \sin \frac{\pi n s_1}{a} \sin \frac{\pi m s_2}{a}}{n^2 + m^2}.$$

Було знайдено, що $M = 0,23144\dots$ для квадрата зі стороною $a = \sqrt{\pi}$, а отже, єдиний додатний розв’язок задачі (4.1) – (4.3) існуватиме і може бути знайдений з двобічними наближеннями при будь-яких $\alpha > 0$ і $0 < \lambda < \lambda_{\max} = \frac{1}{Me} \approx 1,5895$.

Для квадрата зі стороною $a = \sqrt{\pi}$ при значенні параметра $\lambda = 1$ збіжність з точністю 10^{-4} було досягнуто за п’ять ітерацій. На рис. 4.7 наведено графіки верхніх $w^{(k)}(\mathbf{x})$ та нижніх $v^{(k)}(\mathbf{x})$ наближень, $k = 0, 1, 2, 3, 4, 5$, у перері-

$$\text{зі } x_2 = \frac{\sqrt{\pi}}{2}.$$

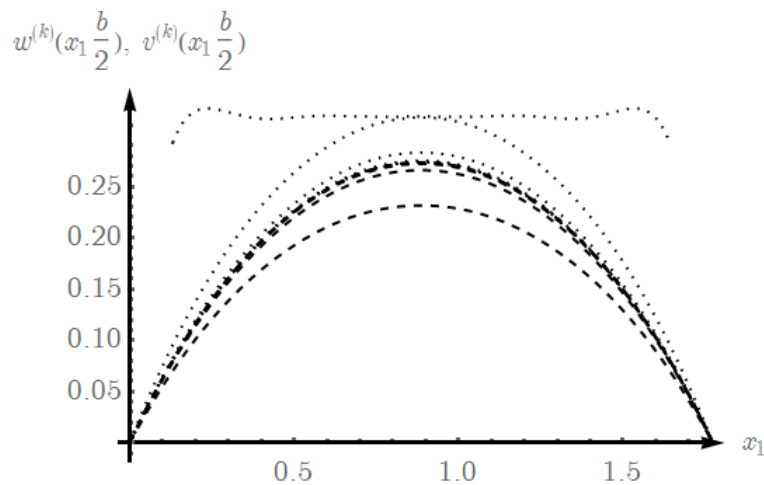


Рисунок 4.7 – Графіки $w^{(k)}(\mathbf{x})$ і $v^{(k)}(\mathbf{x})$, $k = \overline{0,5}$, у перерізі $x_2 = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$
для квадрата зі стороною $a = \sqrt{\pi}$

На рис. 4.8 наведено графік ліній рівня, а на рис. 4.9 наведено графік поверхні наближеного розв'язку $u^{(5)}(\mathbf{x}) = \frac{v^{(5)}(\mathbf{x}) + w^{(5)}(\mathbf{x})}{2}$.

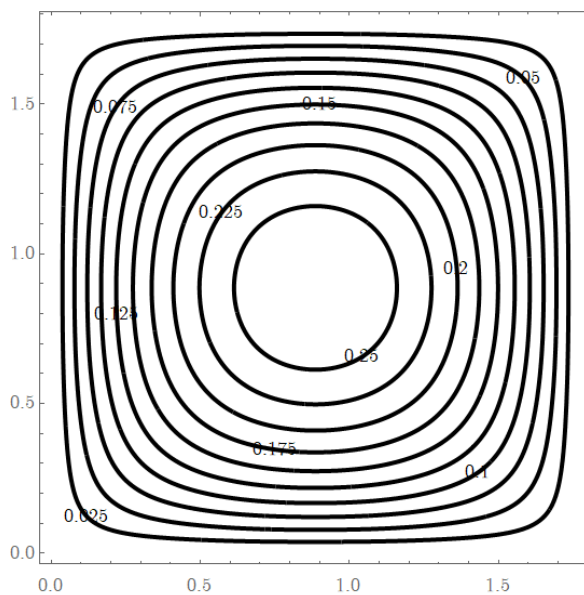


Рисунок 4.8 – Лінії рівня наближеного розв'язку $u^{(5)}(\mathbf{x})$
для квадрата зі стороною $a = \sqrt{\pi}$

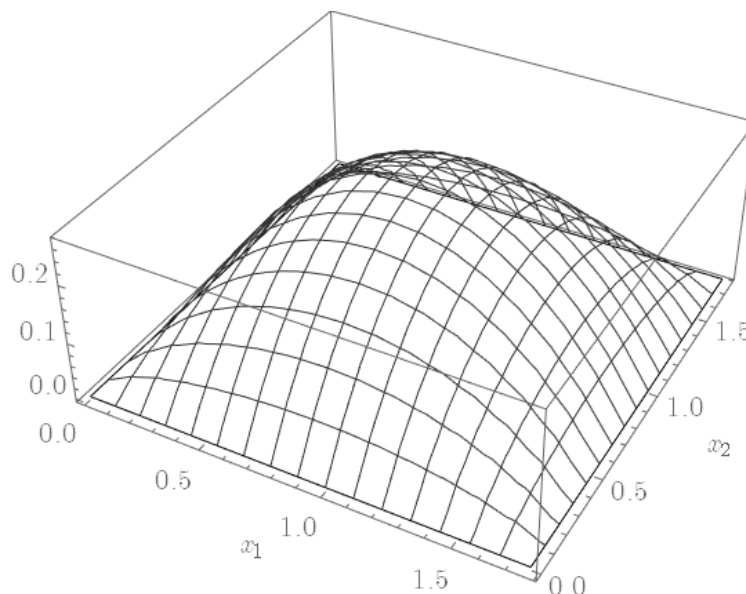


Рисунок 4.9 – Поверхня наближеного розв’язку $u^{(5)}(\mathbf{x})$
для квадрата зі стороною $a = \sqrt{\pi}$

У табл. 4.5 наведено значення оцінки похибки ε_k для двобічного ітераційного процесу, $k = 0, 1, 2, 3, 4, 5$.

Таблиця 4.5 – Значення оцінки похибки ε_k для ітераційного процесу
(2.41) – (2.43) розв’язання задачі (4.1) – (4.3) при $\lambda = 1$
у квадраті зі стороною $a = \sqrt{\pi}$

k	0	1	2	3	4	5
ε_k	$0,32 \cdot 10^0$	$0,43 \cdot 10^{-1}$	$0,86 \cdot 10^{-2}$	$0,16 \cdot 10^{-2}$	$0,29 \cdot 10^{-3}$	$0,54 \cdot 10^{-4}$

З таблиці 4.5 бачимо, що ітерації збігаються зі швидкістю геометричної прогресії зі знаменником, який приблизно дорівнює 0,186.

Нами також було досліджено залежність розв’язку задачі (4.1) – (4.3) від параметра λ . У таблиці 4.6 наведено дані про значення λ , β , кількість зроблених ітерацій N та норму наближеного розв’язку $\|u^{(N)}\| = \max_{\mathbf{x} \in \Omega} u^{(N)}(\mathbf{x})$.

Як бачимо з таблиці 4.6 зі зростанням λ збільшуються кількість ітерацій і норма розв’язку, а значення β наближається до одиниці.

Таблиця 4.6 – Данні про значення λ , β , кількість зроблених ітерацій N та норму наближеного розв’язку $\|u^{(N)}\|$ для задачі (4.1) – (4.3) у квадраті зі стороною $a = \sqrt{\pi}$

λ	β	N	$\ u^{(N)}\ $
0,25	0,06153	2	0,06038
0,50	0,13206	3	0,12604
0,75	0,21529	4	0,19707
1,00	0,31814	5	0,27358
1,25	0,45685	6	0,35557
1,50	0,69709	8	0,44297
1,58	0,894652	8	0,472052

Отже, для всіх трьох областей було чисельно досліджено методом двобічних наближень нелінійну крайову задачу (4.1) – (4.3), яка є математичною моделлю термохімічного процесу. Розв’язки цієї задачі мають спільну тенденцію до зростання їх норми зі зростанням параметра λ незалежно від геометричної форми області. Значення ж λ_{\max} , яке є граничним значення для можливості побудови двобічних наближень, виявилось більшим (при однаковій площі всіх трьох областей) для півкола, але норми розв’язку більші для круга. Порівняння залежності норми розв’язку від λ для різних областей наведено на рис. 4.10.

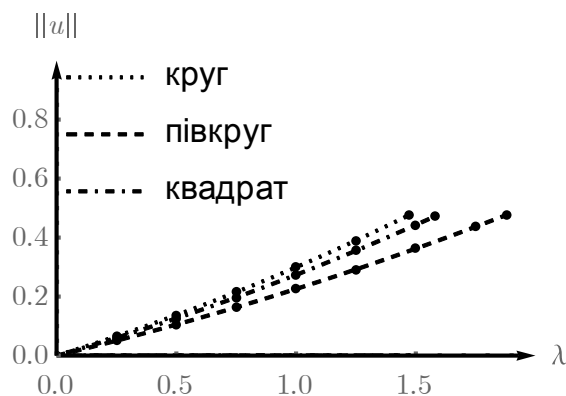


Рисунок 4.10 – Графік залежності норми розв’язку від λ для різних областей

ВИСНОВКИ

У кваліфікаційній роботі було чисельно досліджено методом двобічних наближень на основі використання функції Гріна нелінійну еліптичну крайову задачу, яка є математичною моделлю термохімічного процесу.

1. Проведено аналіз математичних моделей та методів чисельного розв'язання задач термохімії, що дозволило виділити метод двобічних наближень на основі використання функції Гріна як найбільш ефективний у застосуванні до розв'язання задач цього класу.

2. Розглянуто задачу Діріхле для нелінійного еліптичного рівняння з експоненціальною нелінійністю, яка є математичною моделлю термохімічного процесу. За допомогою методу функцій Гріна розглядувана нелінійна крайова задача була зведена до еквівалентного інтегрального рівняння Гаммерштейна, для якого було проведено дослідження методами нелінійного аналізу у напівопорядкованих просторах. Це дозволило отримати умови існування єдиного додатного розв'язку задачі та умови двобічної збіжності до нього послідовних наближень.

3. На основі отриманих результатів було побудовано алгоритм методу двобічних наближень на основі використання методу функцій Гріна, програмно його реалізовано у пакеті Mathematica 12. За допомогою цієї програми було отримано наближені розв'язки нелінійної крайової задачі та проаналізовано залежність норми розв'язку від значення параметра λ .

4. Розроблений програмний продукт можна використовувати для дослідження різних нелінійних крайових задач та їх розв'язків, а також при розв'язанні прикладних задач, які виникають при математичному моделюванні процесів різної природи. Також отримані результати можна розповсюдити на нелінійні крайові задачі з іншими типами нелінійностей.

5. Обмеженість розглянутого підходу пов'язана з необхідністю знати функції Гріна задачі.

ПЕРЕЛІК ДЖЕРЕЛ ПОСИЛАННЯ

1. Агошков В. И., Дубовский П. Б., Шутяев В. П. Методы решения задач математической физики. Москва : Физматлит, 2002. 320 с.
2. Вовченко П. А. Дослідження термохімічних процесів методом двобічних наближень на основі використання функції Гріна // XXV Міжнародний молодіжний форум «Радіоелектроніка та молодь у XXI столітті» : зб. матеріалів форуму (м. Харків, 20-22 квітня 2021 р.). Т. 7/10. Харків : ХНУРЕ, 2021. С. 55 – 56.
3. Гельфанд И. М. Некоторые задачи теории квазилинейных уравнений // Успехи математических наук. 1959. Т. 14, № 2 (86). С. 87 – 158.
4. Двосторонні наближені методи / Б. А. Шувар, М. І. Копач, С. М. Ментинський, А. Ф. Обшта. Івано-Франківськ : ВДВ ЦІТ, 2007. 515 с.
5. Колосова С. В., Сидоров М. В. Применение итерационных методов к решению эллиптических краевых задач с экспоненциальной нелинейностью // Радиоэлектроника и информатика. 2013. № 3 (62). С. 28 – 31.
6. Красносельский М. А. Положительные решения операторных уравнений. Москва : Физматгиз, 1962. 394 с.
7. Курант Р. Уравнения с частными производными. Москва : Мир, 1964. 832 с.
8. Михлин С. Г. Курс математической физики. Москва : Лань, 2002. 576 с.
9. Опойцев В. И., Хуродзе Т. А. Нелинейные операторы в пространствах с конусом. Тбилиси : Изд-во Тбилис. ун-та, 1984. 246 с.
10. Приближенное решение операторных уравнений / М. А. Красносельский, Г. М. Вайникко, П. П. Забрейко [и др.]. Москва : Наука, 1969. 456 с.
11. Рвачев В. Л., Слесаренко А. П. Алгебра логики и интегральные преобразования в краевых задачах. Киев : Наукова думка, 1976. 288 с.
12. Рвачев В. Л., Слесаренко А. П., Сафонов Н. А. Математическое моделирование теплового самовоспламенения для стационарных условий методом R -функций // Доклады Академии наук Украины. 1992. № 12. С. 24 – 27.

13. Самарский А. А. Теория разностных схем. Москва : Наука, 1989. 616 с.
14. Самарский А. А., Вабищевич П. Н. Вычислительная теплопередача. Москва : URSS, 2014. 784 с.
15. Самарский А. А., Вабищевич П. Н. Численные методы решения задач конвекции-диффузии. Москва: URSS, 2015. 248 с.
16. Самарский А. А., Гулин А. В. Численные методы математической физики. Москва : Научный мир, 2003. 316 с.
17. Самарский А. А., Михайлов А. П. Математическое моделирование: Идеи. Методы. Примеры. Москва : Физматлит, 2001. 320 с.
18. Сидоров М. В. Застосування конструктивних методів теорії R -функцій для побудови конусного відрізка при чисельній реалізації двобічних ітераційних методів // Бионика интеллекта. 2017. № 2 (89). С. 43 – 49.
19. Сидоров М.В. Двобічні ітераційні методи чисельного аналізу першої крайової задачі для напівлінійного еліптичного рівняння // Радиоэлектроника и информатика. 2018. № 3 (82). С. 50 – 56.
20. Сидоров М.В. Застосування методів функцій Гріна та квазіфункцій Гріна-Рвачова для побудови двобічних ітераційних процесів розв'язання нелінійних крайових задач // Вісник Запорізького національного університету. Серія: фізико-математичні науки. 2017. № 2. С. 250 – 259.
21. Франк-Каменецкий Д. А. Основы макрокинетики. Диффузия и теплопередача в химической кинетике. Долгопрудный : Издательский Дом «Интеллект», 2008. 408 с.
22. Ananthaswamy V., Rajendran L. Analytical solutions of some two-point nonlinear elliptic boundary value problems // Applied Mathematics. 2012. № 3. P. 1044 – 1058.
23. Carl S. A monotone iterative scheme for nonlinear reaction-diffusion systems having nonmonotone reaction terms // Journal of mathematical analysis and applications. 1988. V. 134, № 1. P. 81 – 93.
24. Guo D., Lakshmikantham V. Coupled fixed points of nonlinear operators with applications // Nonlinear Analysis: Theory, Methods & Applications. 1987.

V. 11, № 5. P. 623 – 632.

25. Hastings C., Mischo K., Morrison M. Hands-On Start to Wolfram Mathematica: And Programming with the Wolfram Language. Wolfram Media, 2016. 484 p.

26. Mohsen A. A simple solution of the Bratu problem // Computers and Mathematics with Applications. 2014. № 67. P. 26 – 33.

27. Pao C. V. Nonlinear parabolic and elliptic equations. New York : Plenum Press, 1992. 794 p.

28. Srivastava A., Shah N. H. Mathematical modelling of nonlinear mass diffusion problem by extended finite element method // Journal of Applied Science and Computations. 2019. V. 6, № 5. P. 559 – 567.

29. Syam M. I., Allan F. M. On the computation of fold points for nonlinear elliptic eigenvalue problems // International Journal of Open Problems in Computer Science and Mathematics. 2011. V. 4, № 1. P. 1 – 17.

30. Yadav N., Yadav A., Deep K. Artificial neural network technique for solution of nonlinear elliptic boundary value problems // Proceedings of Fourth International Conference on Soft Computing for Problem Solving. New Delhi : Springer, 2015. P. 113 – 121.