

Міністерство освіти і науки України
Харківський національний університет радіоелектроніки

Факультет інформаційно-аналітичних технологій та менеджменту

(повна назва)

Кафедра прикладної математики

(повна назва)

КВАЛІФІКАЦІЙНА РОБОТА
Пояснювальна записка

рівень вищої освіти другий (магістерський)

Моделювання процесів самозаймання

з використанням методів Рунге

та двобічних наближень

(тема)

Виконав:

студент 2 курсу, групи ПМм-22-1

Калініченко А.С.

(прізвище, ініціали)

Спеціальність 113 Прикладна математика

(код і повна назва спеціальності)

Тип програми освітньо-професійна

(освітньо-професійна або освітньо-наукова)

Освітня програма Прикладна математика

(повна назва освітньої програми)

Керівник проф. Сидоров М.В.

(посада, прізвище, ініціали)

Допускається до захисту

Зав. кафедри ПМ

(підпис)

Сидоров М.В.

(прізвище, ініціали)

2024 р.

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)

“06” листопада 2023 р.

ЗАВДАННЯ
НА КВАЛІФІКАЦІЙНУ РОБОТУ

студентові Калініченку Анатолію Сергійовичу

(прізвище, ім'я, по батькові)

1. Тема роботи Моделювання процесів самозаймання з використанням методів Роте та двобічних наближень

затверджена наказом по університету від 2 листопада 2023 р. № 1276 Ст

2. Термін подання студентом роботи до екзаменаційної комісії 10 січня 2024 р.

3. Вихідні дані до роботи математична модель процесів самозаймання

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	6 – 12 листопада 2023 р.	виконано
2	Вибір та обґрунтування методу	13 – 26 листопада 2023 р.	виконано
3	Розробка алгоритму і програми	27 листопада – 10 грудня 2023 р.	виконано
4	Проведення аналітичних досліджень та розрахунків	11 грудня – 24 грудня 2023 р.	виконано
5	Робота над текстом пояснювальної записки	25 грудня 2023 р. – 9 січня 2024 р.	виконано
6	Представлення роботи на рецензію в ЕК	10 січня 2024 р.	виконано

Дата видачі завдання 6 листопада 2023 р.

Студент _____
(підпис)

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

РЕФЕРАТ

Пояснювальна записка: 73 с., 6 табл., 13 рис., 1 дод., 20 джерел.

ДВОВИМІРНЕ НАПІВЛІНІЙНЕ РІВНЯННЯ ТЕПЛОПРОВІДНОСТІ, ІЗОТОННИЙ ОПЕРАТОР, ІНВАРІАНТНИЙ КОНУСНИЙ ВІДРІЗОК, МЕТОД ДВОБІЧНИХ НАБЛИЖЕНЬ, МЕТОД РОТЕ, ПРОЦЕСИ САМОЗАЙМАННЯ, РІВНЯННЯ ГАММЕРШТЕЙНА, ФУНКЦІЯ ГРІНА.

Об'єкт дослідження – процеси самозаймання.

Мета роботи – отримання методом Роте в комбінації з методом двобічних наближень на основі використання функції Гріна наближеного розв'язку початково-крайової задачі для двовимірного напівлінійного рівняння теплопровідності (з нелінійною функцією потужності теплових джерел), що виникає при моделюванні процесів самозаймання.

Методи дослідження – метод Роте та метод двобічних наближень на основі використання функції Гріна.

Кваліфікаційна робота присвячена використанню методу Роте в комбінації з методом двобічних наближень на основі використання функції Гріна для розв'язання двовимірної початково-крайової задачі для напівлінійного рівняння теплопровідності, що виникає при математичному моделюванні процесів самозаймання. Проведено наближення потужності внутрішнього джерела тепла за допомогою експоненціальної залежності. Виконано програмну реалізацію розв'язання розглянутої задачі з застосуванням математичного пакету Mathematica 13.3 та отримано чисельний розв'язок для кількох областей.

Наявність альтернативних математичних моделей процесів самозаймання, зокрема тих, що використовують системи диференціальних рівнянь, та розгляд задачі для тривимірного випадку залишають простір для продовження дослідження.

ABSTRACT

Introductory note: 73 pages, 6 tables, 13 figures, 1 appendix, 20 sources.

GREEN'S FUNCTION, HAMMERSTEIN EQUATION, INVARIANT CON-
IC SECTION, ISOTONE OPERATOR, ROTHE'S METHOD, SELF-IGNITION
PROCESSES, SPONTANEOUS IGNITION PROCESSES, TWO-DIMENSIONAL
SEMILINEAR EQUATION OF THERMAL CONDUCTIVITY, TWO-SIDED AP-
PROXIMATION METHOD.

Object of research – processes of spontaneous ignition.

Purpose of work – obtaining by using the method of Rothe in combination with the method of two-sided approximations based on the use of the Green function of the approximate solution of the initial-boundary value problem for a two-dimensional semilinear equation of thermal conductivity (with non-linear function of power of thermal sources), which occurs at modeling of self-ignition processes.

Methods of research – the method of Rothe and the method of two-sided approximations based on the use of the Green function.

The qualifying work is devoted to the use of Rothe's method in combination with the two-sided approximation method, based on the use of the Green's function, to solve a two-dimensional initial-boundary value problem for the semilinear equation of thermal conductivity that arises in the mathematical modeling of spontaneous ignition processes. The power of the internal heat source was approximated using an exponential dependence. The software implementation of the solution of the considered problem with the use of the mathematical package Mathematica 13.3 is executed and the numerical solution is received in various domains.

The availability of alternative mathematical models of spontaneous ignition processes, in particular those that use systems of differential equations, and the consideration of the problem for the three-dimensional case leave space for further research.

ЗМІСТ

	С.
Вступ	8
1 Аналіз предметної області та постановка задач дослідження	10
1.1 Огляд математичних моделей процесів самозаймання	10
1.2 Огляд методів чисельного аналізу процесів самозаймання	15
1.3 Формальна та змістовна постановка задачі	17
1.4 Постановка задач дослідження	20
2 Вибір та обґрунтування методу розв'язання	21
2.1 Основні відомості з теорії нелінійних операторних рівнянь у напівупорядкованих банахових просторах	21
2.2 Застосування методів Рунге та двобічних наближень на основі використання функції Гріна до розв'язання початково-крайової задачі для двовимірного напівлінійного рівняння теплопровідності	27
2.3 Застосування методів Рунге та двобічних наближень на основі використання функції Гріна при дослідженні процесів самозаймання	37
Висновки за розділом 2	42
3 Програмна реалізація	43
3.1 Система комп'ютерної алгебри Mathematica 13.3	43
3.2 Алгоритм розв'язання задачі математичного моделювання процесів самозаймання	44
3.3 Опис програми	45
Висновки за розділом 3	45
4 Результати обчислювального експерименту та їх аналіз	47
4.1 Обчислювальний експеримент для кругової області	48
4.2 Обчислювальний експеримент для півкрової області	53
4.3 Обчислювальний експеримент для прямокутної області	57
Висновки за розділом 4	61

Висновки	62
Перелік джерел посилання	63
Додаток А Лістинг програми	65

ВСТУП

Актуальність теми. Необхідність контролю та профілактики пожеж при зберіганні насипних матеріалів таких, як бавовна, торф, вугілля, зерно, виникає з широкого їх застосування у господарській діяльності. Математичне моделювання їх самозаймання пов'язане з необхідністю знаходження розв'язку початково-крайової задачі для двовимірного напівлінійного рівняння теплопровідності. Оскільки її аналітичне розв'язання часто неможливе, має сенс застосування чисельних методів, зокрема, методу Рунге в поєднанні з ітераційним методом двобічних наближень. Отже, їх використання для знаходження розв'язку початково-крайових задач для напівлінійного рівняння теплопровідності є актуальною задачею.

Мета і завдання кваліфікаційної роботи. Метою кваліфікаційної роботи є застосування методу Рунге у поєднанні з методом двобічних наближень на основі використання функції Гріна для знаходження розв'язку початково-крайової задачі для двовимірного напівлінійного рівняння теплопровідності, що виникає при моделюванні процесів самозаймання.

Для досягнення поставленої мети необхідно виконати наступні завдання:

- провести аналіз математичних моделей процесів самозаймання;
- ознайомитися із методами отримання наближеного розв'язку задач математичної фізики, застосованих для дослідження процесів самозаймання (зокрема, методом Рунге в поєднанні з методом двобічних наближень);
- розробити алгоритм застосування методу Рунге у комбінації з методом двобічних наближень на основі використання функції Гріна до чисельного дослідження двовимірної нелінійної початково-крайової задачі;
- реалізувати розроблений алгоритм в середовищі системи комп'ютерної алгебри Wolfram Mathematica 13.3, провести обчислювальні експерименти для тестової задачі для різних областей та проаналізувати їх результати.

Об'єктом дослідження є процеси самозаймання.

Предметом дослідження є двовимірна початково-крайова задача для напівлінійного рівняння теплопровідності та застосування до знаходження її розв'язку методу Рунге і двобічних наближень на основі використання функції Гріна.

Методи дослідження. У кваліфікаційній роботі використовуються методи теорії нелінійних операторних рівнянь у напівупорядкованих просторах, методи математичної фізики для теоретичного дослідження розглядуваної двовимірної напівлінійної початково-крайової задачі, що виникає при моделюванні самозаймання, та методи Рунге і двобічних наближень для знаходження її чисельного розв'язку.

Публікації. Результати, отримані у кваліфікаційній роботі, було представлено на 27-му Міжнародному молодіжному форумі «Радіоелектроніка та молодь у XXI столітті» (м. Харків, 10 – 12 травня 2023 р.) [1] та на II Міжнародній науково-практичній конференції англійською мовою «Навчання і викладання: після війни та під час миру» (м. Харків, 10 листопада 2023 р.) [2].

1 АНАЛІЗ ПРЕДМЕТНОЇ ОБЛАСТІ ТА ПОСТАНОВКА ЗАДАЧ ДОСЛІДЖЕННЯ

1.1 Огляд математичних моделей процесів самозаймання

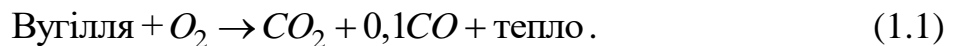
Загоряння деякого матеріалу без впливу зовнішнього джерела запалювання називають процесом самозаймання. Він притаманний таким сипучим матеріалам, як вугілля або зерно, які в господарській діяльності часто поміщають на довгострокове збереження, що і обумовлює необхідність дослідження цього процесу для подальшого прогнозування та попередження пожеж.

Самозаймання насипів вказаних матеріалів відбувається як наслідок акумуляції всередині тепла, достатнього для початку горіння. Це можливо, якщо в насипі відбувається екзотермічна реакція, що виділяє більше тепла, ніж може розсіятися у насипі та випромінитися у навколишнє середовище. Наприклад, для вугілля виділяють такі процеси [3]:

- а) фізична адсорбція;
- б) хімічна адсорбція, яка призводить до утворення вугільно-кисневих сполук і кисневих форм вуглецю (карбоксил, карбоніл);
- в) окиснення, під час якого вугілля та кисень вступають у реакцію із виділенням газоподібних продуктів, як правило, монооксиду вуглецю, вуглекислого газу та водяної пари.

Фізична адсорбція починається відразу після видобутку вугілля та його контакту з повітрям. Разом з нею починається хімічна адсорбція, яка продовжується до нагріву вугілля до 70 С. З цього моменту відбувається випуск продуктів реакції окиснення. Починаючи з 230 С починається горіння, при якому значно пришвидшується, порівняно з попереднім етапом, хімічна реакція окиснення та, як наслідок, зростання температури. Говорять, що в цей момент реакція переходить в етап термічного розгону (thermal runaway). Для попередження пожежі практичну цінність має час індукції – час, за який насип нагрівається від температури навколишнього середовища до температури займання [4].

З вказаних реакцій окиснення є найбільш екзотермічною, тобто в її результаті виділяється більше тепла. Таким чином, при побудові моделі процесів самозаймання іншими реакціями можна знехтувати. Згідно з [4], якщо відкинути незначні по кількості продукти окиснення, то можна стверджувати, що реакція одного моль вугілля та один моль кисню продукує один моль вуглекислого газу, 0,1 моль монооксиду вуглецю та тепло. Тоді хімічне рівняння реакції має вигляд



Як бачимо на прикладі вугілля, можна вважати, що всередині насипу матеріалу є внутрішнє джерело тепла. Тоді для моделювання процесів самозаймання застосовна теорія горіння та вибуху. Вона розроблена для моделювання газів, що вступають в реакцію, М. Семеновим в [5], який сформулював умови займання або вибуху (тобто переходу з індукційного етапу реакції в етап термічного розгону) в температурно-однорідній самонагрівній системі шляхом знаходження точки дотику кривих нагріву і охолодження, та вдосконалена Д. Франк-Каменецьким в [6] введенням у розгляд системи з неоднорідним кондуктивним поширенням тепла через теплообмін. Згідно з теорією горіння математичною моделлю розподілу температури $T(x,t)$ при самозайманні у насипі матеріалу, теплофізичні властивості якого є сталими, є початково-крайова задача для рівняння теплопровідності

$$\rho C \frac{\partial T}{\partial t} = k \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + f(T), \quad (1.2)$$

де ρ – щільність матеріалу;

C – питома теплоємність матеріалу;

k – коефіцієнт теплопровідності матеріалу.

Останній доданок в (1.2) вносить в модель потужність внутрішнього джерела тепла, який згідно з теорією горіння можна апроксимувати, використовуючи рівняння Арреніуса, яке описує залежність швидкості реакції від температури. Повертаючись до (1.1), тепло виділяється внаслідок реакції окиснення вугілля та прискорює хімічну реакцію, що підтверджує запропоновану апроксимацію. Отже,

$$f(T) = Q \cdot \rho \cdot A_0 \cdot e^{-\frac{E_a}{R(T+273)}}, \quad (1.3)$$

де Q – тепло, яке виділяє реакція на одиницю маси;

A_0 – передекспоненціальний коефіцієнт рівняння Арреніуса;

E_a – енергія активації;

R – універсальна газова стала [7].

Для повного формулювання математичної моделі рівняння (1.2) доповнюється початковою та межевою умовами Діріхле, тобто задається початковий $T_0(x)$ та межевий $T_\partial(x, t)$ розподіли температури. Тоді для насипу висоти l , вважаючи, що x вертикальна координата, маємо

$$T(x, 0) = T_0(x), \quad x \in [0, l], \quad (1.4)$$

$$T(0, t) = T_\partial(0, t), \quad T(l, t) = T_\partial(l, t) \quad t \geq 0. \quad (1.5)$$

Розглянута модель є прикладом одновимірних моделей. Її перевага перед моделями з більшою кількістю вимірів полягає у відносній простоті чисельного аналізу, яка втім дається ціною більшої кількості припущень, які обмежують практичну застосовність моделі. У випадку одновимірної моделі (1.2), (1.4), (1.5) припускається, що теплообмін проходить лише між пластами насипу у вертикальній координаті. Випромінювання насипом тепла в навколишнє середовище враховується лише через нижню та верхню грані насипу умовою

(1.5), тоді як теплообміном через інші грані нехтують. Тому у випадках, коли одна сторона насипу значно більша за дві інші (що часто зустрічається на практиці, наприклад, при поміщенні матеріалу в транспортний контейнер прямокутної або циліндричної форми), варто розглядати двовимірну модель [8], що для (1.2), (1.4), (1.5) матиме вигляд

$$\rho C \frac{\partial T}{\partial t} = k \Delta T + Q \cdot \rho \cdot A_0 \cdot e^{-\frac{E_a}{R(T+273)}}, \quad \mathbf{x} \in \Omega, \quad t > 0, \quad (1.6)$$

$$T(\mathbf{x}, 0) = T_0(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \bar{\Omega}, \quad (1.7)$$

$$T(\mathbf{x}, t) = T_{\partial}(\mathbf{x}, t) \text{ на } \partial\Omega, \quad t \geq 0, \quad (1.8)$$

де $\mathbf{x} = (x_1, x_2)$ – просторові координати;

Δ – оператор Лапласа;

Ω – переріз насипу, перпендикулярний до його найдовшої сторони.

Реакція окиснення, яка проходить у насипі пористих матеріалів, потребує наявності реагенту – кисню, концентрація якого може напряму впливати на швидкість протікання цієї реакції. В уже розглянуті моделі можна додати вплив концентрації кисню на оксидацію, розглянувши швидкість реакції як швидкість зміни в концентрації реагентів і продуктів та замінивши (1.3) на

$$f(T) = Q \cdot \rho \cdot A_0 \cdot [O_2]^n \cdot e^{-\frac{E_a}{R(T+273)}},$$

де O_2 – концентрація кисню,

n – порядок реакції [4].

На практиці було встановлено, що для реакції окиснення вугілля порядок реакції n змінюється від 0,5 до 1 [3].

Додатково, для кращого відображення пористості насипу матеріалу варто також використовувати замість щільності матеріалу ρ насипну щільність ρ_m .

Для детальнішого дослідження впливу концентрації кисню в насипі на процеси самозаймання використовують математичні моделі, що складаються з системи диференціальних рівнянь. В [9] розглянуто модель, в якій до рівняння (1.2) додано рівняння для функції концентрації кисню $W(\mathbf{x}, t)$, яка на рівні з функцією розподілу температури $T(\mathbf{x}, t)$ використовується в апроксимації швидкості хімічної реакції:

$$\rho C \frac{\partial T}{\partial t} = k\Delta T + Q \cdot A_0 \cdot W \cdot e^{-\frac{E_a}{R(T+273)}}, \quad (1.9)$$

$$\frac{\partial W}{\partial t} = D\Delta W - A_0 \cdot W \cdot e^{-\frac{E_a}{R(T+273)}}, \quad (1.10)$$

де D – константа, що описує дифузійність кисню.

Екзотермічна реакція окиснення виділяє тепло, яке її пришвидшує, та зменшує концентрацію кисню, яка теж впливає на швидкість реакції, що і відображено в (1.9), (1.10). Вказані рівняння доповнюють межовими умовами

$$k\nabla T + h(T - T_\alpha) = 0 \text{ на } \partial\Omega, \quad (1.11)$$

$$D\nabla W + h_W(W - W_\alpha) = 0 \text{ на } \partial\Omega, \quad (1.12)$$

де ∇ – оператор Гамільтона;

Ω – розглядувана область;

h – стала, що характеризує теплообмін насипу і навколишнього середовища;

h_W – стала, що характеризує перенесення кисню між насипом і навколишнім середовищем;

T_α – температура навколишнього середовища;

W_α – концентрація кисню в навколишньому середовищі.

Вказані фактори також враховуються в математичній моделі, описаній в [10]. Розгляд системи диференціальних рівнянь дає можливість переносити на

модель більше властивостей реального об'єкта або процесу, ніж якщо обмежуватись одним рівнянням. В [3, 11] цей підхід за рахунок додавання рівнянь балансу імпульсу та неперервності до рівнянь для розподілу температури та концентрації кисню дозволяє враховувати вплив на процеси самозаймання водяної пари, що може виступити в ролі каталізатора. Така зміна дозволяє промоделювати просушення насипу або ситуацію збільшення насиченості пари за рахунок вологи з навколишнього середовища, що збільшує кількість практичних ситуацій, для яких підходить така математична модель.

Звичайно, збільшення кількості диференціальних рівнянь, зокрема рівнянь в частинних похідних, значно ускладнює їх чисельний аналіз. Крім того, такі моделі потребують більше емпіричних даних, причому отримання деяких з них, таких як концентрація кисню у насипі або навколишньому середовищі, поза лабораторними умовами є проблематичним.

Таким чином, перспективною для дослідження є двовимірною модель (1.6) – (1.8), яка є компромісом між простотою і умовністю відображення процесів самозаймання одновимірної моделі (1.2), (1.4), (1.5) та складністю у використанні і більшій адекватності моделей, що складаються з систем диференціальних рівнянь.

1.2 Огляд методів чисельного аналізу процесів самозаймання

Математичне моделювання є ефективним інструментом дослідження явищ реального світу, і процеси теорії горіння не є виключенням. Однак, його застосування часто ставить дослідника перед необхідністю розгляду нелінійних початково-крайових задач для рівняння теплопровідності, які не завжди допускають отримання точного розв'язку. Це приводить до необхідності використання чисельних методів, які дозволяють отримати наближений розв'язок таких задач. Зазвичай ідея таких методів полягає у заміні вихідної задачі системою алгебраїчних чи диференціальних рівнянь меншого порядку

або, наприклад, послідовністю крайових задач, та їх розв'язання. Розглянемо ці методи.

Для використання методу Гальоркіна для нелінійних рівнянь обирається набір базисних функцій $\varphi_1(\mathbf{x}), \dots, \varphi_n(\mathbf{x})$, які задовольняють крайові умови задачі та утворюють повну систему. Тоді наближений розв'язок шукають у вигляді розкладу $u(\mathbf{x}, t) = \sum_{i=1}^n C_i(t)\varphi_i(\mathbf{x})$, де коефіцієнти $C_i(t)$ знаходять із умови ортогональності базисним функціям відхилу, отриманого при підстановці $u(\mathbf{x}, t)$ в рівняння. В результаті вихідна задача знаходження розв'язку нелінійної початково-крайової задачі зводиться до задачі знаходження розв'язку нелінійної системи звичайних диференціальних рівнянь.

Метод скінченних різниць (метод сіток) полягає у введенні в $\Omega \times [0, t_m]$ (тут Ω – область для просторових координат, t_m – час моделювання) сітки з деяким кроком, можливо різним для кожної змінної, і розгляду значення шуканої функції в кожному вузлі як окремої невідомої. Апроксимацією диференціальних операторів відбувається заміна нелінійного диференціального рівняння задачі системою нелінійних алгебраїчних або трансцендентних рівнянь [12]. Отримана система розв'язується деяким ітераційним чисельним методом, наприклад, методом Ньютона, при чому розв'язком є набір значень функції у вузлах введеної сітки – каркас наближеного розв'язку, за яким апаратом теорії інтерполяції можна отримати наближений розв'язок у вигляді неперервної функції. Для похибки цього методу є теоретичні оцінки в залежності від кроку сітки.

У [13] описане застосування методу скінченних різниць для нелінійного диференціального рівняння, що описує розподіл температури в тілі з внутрішнім джерелом тепла. Окрім цього, розглянуто застосування апроксимації для частинних похідних лише по просторовим або часовій змінним.

Застосування дискретизації лише за просторовими координатами є ідеєю методу прямих. Як і в попередньому методі, похідні апроксимуються за

допомогою скінченних різниць, результатом чого є система звичайних диференціальних рівнянь. Застосування методу прямих для розв'язання математичної моделі (1.9) – (1.12) розглянуто в [9].

Метод Роте, запропонований в [14], передбачає введення на інтервалі $[0, t_m]$ сітки та апроксимацію диференціального оператора за часовою змінною в її вузлах. Це дає змогу перейти від початково-крайової задачі перейти до серії крайових задач, що розв'язуються послідовно застосуванням деякого чисельного методу, наприклад, методу Рітца або методу двобічних наближень.

Для розв'язання кожної задачі із отриманої серії методом Рітца її формулюють у варіаційній формі та обирають набір функцій $\varphi_1(\mathbf{x}), \dots, \varphi_n(\mathbf{x})$, які задовольняють крайові умови. Тоді наближений розв'язок шукають у вигляді $u(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^n C_i \varphi_i(\mathbf{x})$, де коефіцієнти C_i знаходять із умови мінімізації відповідного функціоналу енергії.

При використанні методу двобічних наближень вихідна нелінійна крайова задача за допомогою функції Гріна зводиться до еквівалентного інтегрального рівняння Гаммерштейна, яке досліджується методами нелінійного функціонального аналізу в напівупорядкованих просторах. Будуються дві послідовності функцій (причому процеси їх побудови можна проводити паралельно), які з двох боків (зверху і знизу) збігаються до точного розв'язку задачі, що дозволяє на кожній ітерації мати апостеріорну оцінку похибки, а отже, і зручний критерій закінчення ітерацій.

1.3 Формальна та змістовна постановка задачі

Розглянемо процес самозаймання в насипі матеріалу, форма якого дозволяє стверджувати, що його один вимір (сторона) значно більший за два інші. Виділимо область $\Omega \subset \mathbb{R}^2$, яка описує переріз насипу, перпендикулярний до вказаного виміру.

На рис. 1.1 як приклад наведено візуалізацію насипу вугілля циліндричної форми (зліва червоним пунктиром виділено $\partial\Omega$) та відповідної йому області Ω (справа), яка в цьому випадку є кругом з радіусом 1 та центром в точці початку координат.

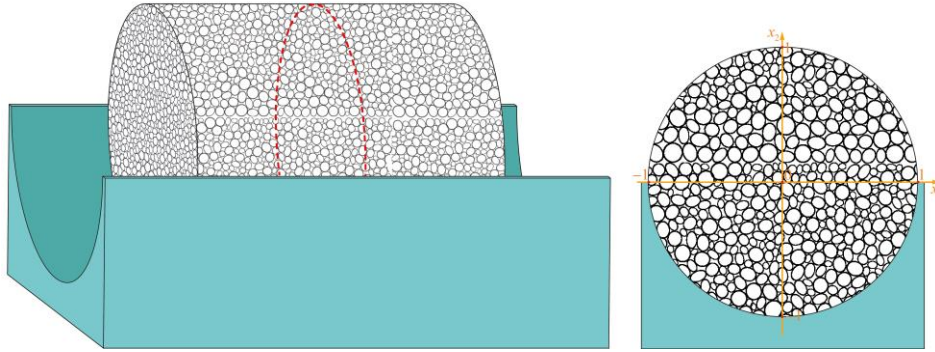


Рисунок 1.1 – Зображення насипу вугілля циліндричної форми та його перерізу, що описується областю Ω

Нехай розповсюдження тепла всередині насипу матеріалу зі сталими теплофізичними властивостями відбувається лише через теплопровідність. Тоді, відповідно до (1.6) – (1.8), для моделювання розподілу температури $T(\mathbf{x}, t)$ в Ω для процесу самозаймання маємо початково-крайову задачу

$$\rho C \frac{\partial T}{\partial t} = k \Delta T + Q \cdot \rho \cdot A_0 \cdot e^{-\frac{E_a}{R(T+273)}}, \quad \mathbf{x} \in \Omega, \quad t > 0, \quad (1.13)$$

$$T(\mathbf{x}, 0) = T_0(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \bar{\Omega}, \quad (1.14)$$

$$T(\mathbf{x}, t) = T_\partial(\mathbf{x}, t) \text{ на } \partial\Omega, \quad t \geq 0. \quad (1.15)$$

Тут $T_0(\mathbf{x})$ – початковий, а $T_\partial(\mathbf{x}, t)$ – крайовий розподіли температури, причому $T_\partial(\mathbf{x}, 0) = T_0(\mathbf{x})$.

Слідуючи принципам теорії горіння введемо у розгляд безрозмірну функцію зміни температури

$$\theta(\mathbf{x}, t) = \frac{E_a}{R(T_0(\mathbf{x}) + 273)} (T(\mathbf{x}, t) - T_0(\mathbf{x})).$$

Тоді

$$\theta_0(\mathbf{x}, t) = \frac{E_a}{R(T_0(\mathbf{x}) + 273)} (T(\mathbf{x}, 0) - T_0(\mathbf{x})) = 0,$$

$$\theta_{\partial}(\mathbf{x}, t) = \frac{E_a}{R(T_0(\mathbf{x}) + 273)} (T_{\partial}(\mathbf{x}, t) - T_0(\mathbf{x})).$$

Нехай на поверхні насипу підтримується стала температура, тоді $T_{\partial}(\mathbf{x}, t) = T_{\partial}^C(\mathbf{x})$, а оскільки $T_{\partial}^C(\mathbf{x})$ не залежить від часу і $T_{\partial}(\mathbf{x}, 0) = T_0(\mathbf{x})$, то $T_{\partial}^C(\mathbf{x}) = T_0(\mathbf{x})$ на $\partial\Omega$, тому

$$\theta_{\partial}(\mathbf{x}, t) = \frac{E_a}{R(T_0(\mathbf{x}) + 273)} (T_{\partial}^C(\mathbf{x}) - T_0(\mathbf{x})) = 0 \text{ на } \partial\Omega.$$

Останній доданок в правій частині рівняння (1.13), використовуючи розклад експоненти в законі Арреніуса [15], можна записати для $\theta(\mathbf{x}, t)$ таким чином:

$$Q \cdot \rho \cdot A_0 \cdot e^{-\frac{E_a}{R(T+273)}} \approx Q \cdot \rho \cdot A_0 \cdot e^{-\frac{E_a}{R(T_0+273)}} e^{\theta},$$

а задача (1.13) – (1.15) після введення коефіцієнта температуропровідності

$$A = \frac{k}{\rho C} \text{ та позначення } B \approx B(\mathbf{x}) = \frac{QA_0}{C} e^{-\frac{E_a}{R(T_0(\mathbf{x})+273)}} \text{ (в припущенні, що } T_0(\mathbf{x})$$

дозволяє таку заміну) набуде вигляду

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = A \Delta \theta + B e^{\theta}, \quad \mathbf{x} \in \Omega, \quad t > 0, \quad (1.16)$$

$$\theta(\mathbf{x}, 0) = 0, \quad \mathbf{x} \in \bar{\Omega}, \quad (1.17)$$

$$\theta(\mathbf{x}, t) = 0 \text{ на } \partial\Omega, \quad t \geq 0. \quad (1.18)$$

Параметри A та B відображають фізико-хімічні властивості насипу матеріалу та визначаються емпіричним шляхом.

1.4 Постановка задач дослідження

Проведений аналіз математичних моделей процесів самозаймання та методів їх чисельного аналізу показав перспективність дослідження двовимірної початково-крайової задачі для напівлінійного рівняння теплопровідності із застосуванням для її чисельного аналізу методу Рунге та методу двобічних наближень.

Метою кваліфікаційної роботи є застосування методу Рунге в поєднанні з методом двобічних наближень на основі використання функції Гріна до чисельного аналізу двовимірної першої крайової задачі для диференціальних рівнянь в частинних похідних (рівняння теплопровідності) з експоненціальною нелінійною апроксимацією потужності внутрішнього джерела тепла, які використовують для моделювання процесу самозаймання.

Для досягнення поставленої мети необхідно:

- провести аналіз математичних моделей процесів самозаймання;
- ознайомитися із методами отримання наближеного розв'язку задач математичної фізики, застосованих для дослідження процесів самозаймання (зокрема, методом Рунге в поєднанні з методом двобічних наближень);
- розробити алгоритм застосування методу Рунге у комбінації з методом двобічних наближень на основі використання функції Гріна до чисельного дослідження двовимірної нелінійної початково-крайової задачі;
- реалізувати розроблений алгоритм в середовищі системи комп'ютерної алгебри Wolfram Mathematica 13.3, провести обчислювальні експерименти для тестової задачі в різних областях та проаналізувати їх результати.

2 ВИБІР ТА ОБҐРУНТУВАННЯ МЕТОДУ РОЗВ'ЯЗАННЯ

2.1 Основні відомості з теорії нелінійних операторних рівнянь у напівупорядкованих банахових просторах

Розглянемо основні відомості з теорії нелінійного аналізу в напівупорядкованих банахових просторах [16, 17].

Нехай \mathcal{U} – дійсний банахів простір з нульовим елементом θ .

Відрізком, який з'єднує точки u і w банахового простору \mathcal{U} , називатимемо множину елементів $tu + (1-t)w$ при $u, w \in \mathcal{U}$, $0 \leq t \leq 1$ та позначатимемо як $[u, w]$.

Тоді множину $M \subset \mathcal{U}$ називатимемо опуклою, якщо разом з будь-якими двома її точками вона містить відрізок, що їх з'єднує, тобто для всіх $u, v \in M$ $[u, w] \subset M$.

Множина точок tu , де $t \geq 0$, називається променем, який проходить через точку $u \in \mathcal{U}$, $u \neq \theta$.

Замкнена опукла множина $\mathcal{K} \subset \mathcal{U}$ називається конусом, якщо для будь-якої точки $u \in \mathcal{K}$, $u \neq \theta$, вона містить промінь, що проходить через цю точку, та якщо $u \in \mathcal{K}$ і $-u \in \mathcal{K}$ можливо одночасно лише якщо $u = \theta$.

Простір \mathcal{U} є напівупорядкованим, якщо для будь-якої пари $v, w \in \mathcal{U}$ визначено таке бінарне відношення \leq , що:

а) з $u \leq v$ випливає, що $\alpha u \leq \alpha v$ при $\alpha \geq 0$ і $\alpha v \leq \alpha u$ при $\alpha < 0$;

б) з $u \leq v$ і $u \geq v$ випливає, що $u = v$;

в) з $u_1 \leq v_1$ і $u_2 \leq v_2$ випливає, що $u_1 + u_2 \leq v_1 + v_2$;

г) з $u \leq v$ і $v \leq w$ випливає, що $u \leq w$.

В просторі \mathcal{U} напівупорядкованість можна ввести будь-яким конусом $\mathcal{K} \in \mathcal{U}$ за правилом: $u \leq w$, якщо $w - u \in \mathcal{K}$. Той випадок, коли $u \leq w$ і $u \neq w$, позначимо $u < w$. Аналогічно вводяться позначення \geq та $>$:

$$u \geq w := u - w \in \mathcal{K}, \quad u > w := (u \geq w) \wedge (u \neq w).$$

Додатними називатимемо елементи $u \geq \theta$ (тобто $u \in \mathcal{K}$).

За допомогою конуса \mathcal{K} можна виділити два типи послідовностей: $\{u_n\}_{n \in \mathbb{N}} \subset \mathcal{U}$ є неспадною, якщо $u_1 \leq u_2 \leq \dots \leq u_n \leq \dots$, і незростаючою, якщо $u_1 \geq u_2 \geq \dots \geq u_n \geq \dots$. Також послідовність $\{u_n\}_{n \in \mathbb{N}} \subset \mathcal{U}$ є обмеженою зверху за конусом \mathcal{K} , якщо існує $u_0 \in \mathcal{U}$, такий що $u_n \leq u_0$ для всіх $n = 1, 2, \dots$, і обмеженою знизу, якщо $u_n \geq u_0$ для всіх $n = 1, 2, \dots$.

У просторі функцій $\mathcal{C}(\bar{\Omega})$, неперервних у вимірній області $\Omega \subset \mathbb{R}^m$, можна виділити конус невід'ємних функцій

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

яким в просторі $\mathcal{C}(\bar{\Omega})$ вводиться напівупорядкованість, що має наступний сенс:

$$u \leq w := u(\mathbf{x}) \leq w(\mathbf{x}) \quad \forall \mathbf{x} \in \bar{\Omega}.$$

Введемо поняття конусного відрізка – множини $\langle v, w \rangle := \{u \in \mathcal{U} : v \leq u \leq w\}$ у просторі \mathcal{U} , напівупорядкованому конусом \mathcal{K} .

Нормальним в просторі \mathcal{U} називається конус \mathcal{K} з напівмонотонною нормою, тобто такою, для якої існує константа нормальності конуса $N > 0$ така, що з $\theta \leq u \leq w$ випливає $\|u\| \leq N \|w\|$.

При $N = 1$ конус називають гострим, а норму – монотонною.

Вже згаданий раніше конус \mathcal{K}_+ у просторі $\mathcal{C}(\bar{\Omega})$ є нормальним і навіть гострим.

З напівупорядкованістю простору \mathcal{U} деяким конусом \mathcal{K} пов'язані деякі властивості оператора T , діючого в цьому просторі. Наведемо основні типи операторів.

Оператор $T: \mathcal{U} \rightarrow \mathcal{U}$ називається додатним, якщо він залишає інваріантним конус \mathcal{K} , тобто для будь-якого $u \in \mathcal{K}$ $T(u) \in \mathcal{K}$.

Надалі зафіксуємо $u_0 \in \mathcal{K}$, $u_0 \neq \theta$, та позначимо через \mathcal{U}_{u_0} множину $\{u \in \mathcal{U} : -\gamma u_0 \leq u \leq \gamma u_0\}$ при деякому $\gamma > 0$ з u_0 -нормою

$$\|u\|_{u_0} = \min\{\gamma : -\gamma u_0 \leq u \leq \gamma u_0\},$$

збіжність за якою для конусу \mathcal{K} , за умови його нормальності, тягне за собою також збіжність за нормою простору \mathcal{U} . А через $\mathcal{K}(u_0)$ позначимо множину елементів

$$\{u \in \mathcal{K} : \exists \alpha = \alpha(u) > 0, \beta = \beta(u) > 0 \text{ такі, що } \alpha u_0 \leq u \leq \beta u_0\}.$$

Введемо такий підклас додатних операторів як u_0 -додатні. Додатний оператор $T \in u_0$ -додатним, якщо $T(u) \in \mathcal{K}(u_0)$ для будь-якого ненульового $u \in \mathcal{K}$, $u \neq \theta$.

Важливим для застосування видом є монотонні оператори. Оператор T , що діє в просторі \mathcal{U} , є монотонним (ізотонним), якщо для будь-яких елементів $u, w \in \mathcal{U}$ з $u \geq w$ випливає $T(u) \geq T(w)$, і антимонотонним, якщо $T(u) \leq T(w)$.

Далі розглянемо типи операторів, що виділяються характером зміни значень уздовж променів, що лежать в конусі \mathcal{K} .

Увігнутий є u_0 -додатний оператор $T: \mathcal{U} \rightarrow \mathcal{U}$, якщо

$$T(\tau u) > \tau T(u),$$

для всіх $u \in \mathcal{K}(u_0)$, $\tau \in (0, 1)$.

Якщо оператор T – ізотонний та увігнутий, то ці властивості переносяться і на T^2, T^3, \dots [16].

Увігнутий оператор T є u_0 -увігнутим, якщо можна вказати $\eta = \eta(u, \tau) > 0$ для будь-яких $u \in K(u_0)$ і $\tau \in (0, 1)$ таке, що

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

Розглянемо в напівупорядкованому конусом \mathcal{K} банаховому просторі \mathcal{U} рівняння з додатним ізотонним нелінійним оператором $T(u)$:

$$u = T(u), \quad (2.1)$$

та умови, за виконання яких воно матиме хоча б один додатний розв'язок $u^* \in \mathcal{K}$, $u^* > \theta$. Нас цікавлять тільки нетривіальні розв'язки, тому якщо $T(\theta) = \theta$, то мова йтиме про інший, відмінний від θ , розв'язок.

Почнемо з питання існування нерухомої точки у ізотонного оператора.

Нехай у ізотонного оператора T є інваріантний конусний відрізок $\langle v_0, w_0 \rangle$, тобто такий відрізок, що переводиться цим оператором сам у себе:

$$T(v_0) \geq v_0, \quad T(w_0) \leq w_0. \quad (2.2)$$

Іншими словами, інваріантність $\langle v_0, w_0 \rangle$ для оператора T означає, що $T(\langle v_0, w_0 \rangle) \subseteq \langle v_0, w_0 \rangle$.

Розглянемо ітераційний процес

$$u^{(k+1)} = T(u^{(k)}), \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (2.3)$$

Спочатку покладемо за $u^{(0)}$ лівий кінець конусного відрізка $\langle v_0, w_0 \rangle$ $u^{(0)} = v_0$. Тоді через його інваріантність можемо стверджувати, що

$u^{(1)} = T(u^{(0)}) \geq u^{(0)}$, тобто $u^{(1)} \geq u^{(0)}$. Наступну ітерацію процесу (2.3) тоді можна записати як

$$u^{(2)} = T(u^{(1)}) = T^2(u^{(0)}) = T(T(u^{(0)})) \geq T(u^{(0)}),$$

тобто отримали, що $u^{(2)} \geq u^{(1)}$.

Результатом індуктивного продовження цього процесу є монотонно зростаюча послідовність нерівностей

$$v = u^{(0)} \leq T(u^{(0)}) \leq T^2(u^{(0)}) \leq \dots \leq T^k(u^{(0)}) \leq \dots$$

Якщо вона є збіжною, а оператор T – неперервний, то в (2.3) можна виконати граничний перехід та зробити висновок про існування нерухомої точки v^* оператора T та збіжність до неї (2.3).

Аналогічно, поклавши як $u^{(0)}$ правий кінець конусного відрізка $\langle v_0, w_0 \rangle$ $u^{(0)} = w_0$ можна отримати монотонно спадну послідовність нерівностей:

$$\dots \leq T^k(u^{(0)}) \leq \dots \leq T^2(u^{(0)}) \leq T(u^{(0)}) \leq u^{(0)} = w,$$

яка є збіжною до нерухомої точки w^* оператора T .

При цьому має місце нерівність

$$v^* \leq u^* \leq w^*$$

для будь-якої нерухомої точки $u^* \in \langle v_0, w_0 \rangle$ оператора T .

Якщо факт єдиності нерухомої точки $u^* \in \langle v_0, w_0 \rangle$ є встановленим, то послідовності $\{T^k(v_0)\}$ і $\{T^k(w_0)\}$ збігатимуться до однієї і тієї ж границі u^* , як

і метод послідовних наближень (2.3), з будь-якої початкової точки $u^{(0)} \in \langle v_0, w_0 \rangle$.

Теорема 2.1 (про існування нерухомої точки у ізотонного оператора). Нехай \mathcal{K} – нормальний конус, T – цілком неперервний ізотонний оператор з інваріантним конусним відрізком $\langle v_0, w_0 \rangle$. Тоді послідовні наближення (2.3) збігаються при $u^{(0)} = v_0$ та $u^{(0)} = w_0$ до нерухомих точок оператора T v^* і w^* відповідно. Якщо встановлено факт єдиності нерухомої точки $u^* \in \langle v_0, w_0 \rangle$, то ітераційний процес (2.3), починаючи з будь-якої точки $u^{(0)} \in \langle v_0, w_0 \rangle$, збігається до цієї u^* .

Тоді введемо у розгляд, опираючись на (2.3), ітераційну схему

$$\begin{aligned} v^{(k+1)} &= T(v^{(k)}), \quad w^{(k+1)} = T(w^{(k)}), \quad k = 0, 1, 2, \dots, \\ v^{(0)} &= v_0, \quad w^{(0)} = w_0, \end{aligned} \quad (2.4)$$

для якої має місце така теорема [16, 17].

Теорема 2.2. Нехай \mathcal{K} – нормальний конус, T – u_0 -увігнутий ізотонний оператор з інваріантним конусним відрізком $\langle v_0, w_0 \rangle \subset K(u_0)$. Тоді вказаний оператор має нерухому точку $u^* \in \langle v_0, w_0 \rangle$ і до неї двобічно збігаються ітераційні процеси (2.4).

Тобто u_0 -увігнутість ізотонного оператора T забезпечує існування його єдиної нерухомої точки u^* . Тоді до цієї нерухомої точки двобічно збігатиметься ітераційна схема (2.4) (і незалежно один від одного, що дозволяє реалізовувати ітерації паралельно) з виконанням послідовності нерівностей

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

Ці нерівності характеризують побудовану ітераційну схему (2.4) як метод двобічних наближень, оскільки на кожній ітерації нижнє та верхнє наближення з двох сторін обмежують точний розв'язок u^* операторного рівняння (2.1). Тому вважатимемо

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

наближеним розв'язком рівняння (2.1) на k -й ітерації. Його похибку можна оцінити як

$$\|u^* - u^{(k)}\| \leq \frac{1}{2} \|w^{(k)} - v^{(k)}\|,$$

тому якщо $\|w^{(k)} - v^{(k)}\| < 2\varepsilon$, то з точністю ε можна покласти $u^* \approx u^{(k)}$.

2.2 Застосування методів Роте та двобічних наближень на основі використання функції Гріна до розв'язання початково-крайової задачі для двовимірного напівлінійного рівняння теплопровідності

Розглянемо в обмеженій вимірній за Жорданом області $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ з кусково-гладкою межею $\partial\Omega$ двовимірну початково-крайову задачу для напівлінійного рівняння теплопровідності

$$\frac{\partial u}{\partial t} - a^2 \Delta u = f(\mathbf{x}, t, u), \quad \mathbf{x} \in \Omega, \quad t \in (0, t_0], \quad (2.5)$$

$$u(\mathbf{x}, t) > 0, \quad \mathbf{x} \in \Omega, \quad t \in [0, t_0], \quad (2.6)$$

$$u|_{\partial\Omega} = 0, \quad t \in [0, t_0], \quad (2.7)$$

$$u|_{t=0} = \varphi(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \Omega, \quad (2.8)$$

до якої застосуємо метод Рунге в поєднанні з методом двобічних наближень на основі використання функції Гріна [18].

Вважатимемо, що

$$f(\mathbf{x}, t, u) \text{ неперервна і додатна, якщо } (\mathbf{x}, t) \in \bar{Q}, u > 0,$$

$$\varphi(\mathbf{x}) \text{ неперервна і додатна, якщо } \mathbf{x} \in \Omega, \varphi|_{\partial\Omega} = 0,$$

де $\bar{Q} = \{(\mathbf{x}, t) \mid \mathbf{x} \in \bar{\Omega}, t \in [0, t_0]\}$.

На часовому відрізку $[0, t_0]$ введемо сітку з кроком τ , вузлами якої є точки:

$$t_j = j\tau, \quad j = 0, 1, 2, \dots, m, \quad m\tau = t_0,$$

та введемо позначення

$$U_j = U_j(\mathbf{x}) = u(\mathbf{x}, t_j), \quad j = 0, 1, 2, \dots, m.$$

Розв'язок задачі (2.5) – (2.8), відповідно до методу Рунге, шукатимемо вздовж прямих $t = \text{const}$. Для цього в рівнянні (2.5) на прямій $t = t_j$, $j = 1, 2, \dots, m$, апроксимуємо відношенням скінченних різниць диференціальний

оператор $\frac{\partial u}{\partial t}$:

$$\frac{\partial u}{\partial t} \approx \frac{U_j - U_{j-1}}{\tau},$$

та з похибкою $O(\tau)$ замінимо на цій прямій вихідне рівняння нелінійним еліптичним рівнянням

$$\frac{U_j - U_{j-1}}{\tau} - a^2 \Delta U_j = f(\mathbf{x}, t_j, U_j). \quad (2.9)$$

На відміну від класичного методу Рунге [14], апроксимація нелінійності $f(\mathbf{x}, t, u)$ в (2.9) використовує значення функції на поточному часовому шарі U_j , а не на попередньому.

Використовуючи початкову умову (2.8) отримаємо значення $u(\mathbf{x}, t)$ на часовому шарі $t_0 = 0$:

$$U_0(\mathbf{x}) = \varphi(\mathbf{x}). \quad (2.10)$$

Рівняння (2.9), яким було замінене вихідне (2.5), також розглядається при $\mathbf{x} \in \Omega$. Зважаючи на (2.7) маємо крайову умову

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

за допомогою якої для кожного з рівнянь (2.9) можемо поставити першу крайову задачу.

Отже, знаходження розв'язку вихідної початково-крайової задачі (2.5) – (2.8) звели до розв'язання послідовності крайових задач

$$-\Delta U_j + \frac{1}{a^2 \tau} U_j = \frac{1}{a^2 \tau} U_{j-1} + \frac{1}{a^2} f(\mathbf{x}, t_j, U_j), \quad \mathbf{x} \in \Omega, \quad (2.11)$$

$$U_j(\mathbf{x}) > 0, \quad \mathbf{x} \in \Omega, \quad (2.12)$$

$$U_j|_{\partial\Omega} = 0, \quad (2.13)$$

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

$$U_0(\mathbf{x}) = \varphi(\mathbf{x}),$$

до кожної з яких застосуємо метод двобічних наближень на основі використання функції Гріна.

Крайові задачі (2.11) – (2.13) розв’язуватимемо послідовно, тому при знаходженні функції U_j , $j=1, 2, \dots, m$, уже знайдено функцію U_{j-1} як розв’язок попередньої задачі, тому права частина рівняння (2.11) дозволяє позначення:

$$F_j(\mathbf{x}, U_j) = \frac{1}{a^2 \tau} U_{j-1} + \frac{1}{a^2} f(\mathbf{x}, t_j, U_j). \quad (2.14)$$

Розглянемо (2.11) – (2.13) для деякого фіксованого j . Нехай $G(\mathbf{x}, \mathbf{s})$ – функція Гріна першої крайової задачі для оператора Гельмгольца в області Ω . Тоді задача (2.11) – (2.13) еквівалентна

$$U_j(\mathbf{x}) = \int_{\Omega} G(\mathbf{x}, \mathbf{s}) F_j(\mathbf{s}, U_j(\mathbf{s})) ds. \quad (2.15)$$

Рівняння (2.15) є інтегральним рівнянням Гаммерштейна. Розглянемо його у банаховому просторі $C(\bar{\Omega})$ з нормою $\|U\| = \max_{\mathbf{x} \in \bar{\Omega}} |U(\mathbf{x})|$, в якому введемо напівупорядкованість за допомогою конуса невід’ємних та неперервних на $\bar{\Omega}$ функцій \mathcal{K}_+ .

Шукатимемо розв’язок $U_j(\mathbf{x})$ крайової задачі (2.11) – (2.13) як неперервний розв’язок інтегрального рівняння (2.15).

Класичним розв’язком задачі (2.11) – (2.13) називатимемо функцію $U_j^* \in C^2(\Omega) \cap C(\bar{\Omega})$, якщо вона задовольняє рівняння (2.11) і умови (2.12), (2.13), а узагальненим розв’язком – функцію $U_j^* \in \mathcal{K}_+$, яка є розв’язком інтегрального рівняння (2.15). Класичний розв’язок задачі (2.11) – (2.13), за умови існування, задовольняє також інтегральне рівняння (2.15). Надалі шукатимемо узагальнений розв’язок.

Введемо у просторі $C(\bar{\Omega})$ за правилом

$$T_j(U)(\mathbf{x}) = \int_{\Omega} G(\mathbf{x}, \mathbf{s}) F_j(\mathbf{s}, U(\mathbf{s})) ds \quad (2.16)$$

нелінійний інтегральний оператор T_j .

Нехай $f(\mathbf{x}, t, u)$ – невід’ємна, неперервна за сукупністю змінних \mathbf{x} , t , u функція, яка монотонно зростає за u для всіх $\mathbf{x} \in \Omega$, $t \in (0, t_0]$. Тоді функція $F_j(\mathbf{x}, U_j)$ також монотонно зростатиме за u для всіх $\mathbf{x} \in \Omega$, $t \in (0, t_0]$. Оскільки $U_{j-1}(\mathbf{x})$ – неперервна і невід’ємна на $\bar{\Omega}$ функція, то, зважаючи на (2.14), функція $F_j(\mathbf{x}, u)$ – неперервна за сукупністю змінних \mathbf{x} , u і невід’ємна функція, монотонно зростаюча за u для всіх $\mathbf{x} \in \Omega$. Тоді оператор T_j вигляду (2.16) ізотонний та цілком неперервний. Також він матиме наступні властивості [18]:

1) є додатним і навіть u_0 -додатним оператором з функцією

$$u_0(\mathbf{x}) = \int_{\Omega} G(\mathbf{x}, \mathbf{s}) ds; \quad (2.17)$$

2) увігнутим і навіть u_0 -увігнутим оператором з функцією $u_0^j(x)$ вигляду (2.17), якщо для усіх $u > 0$ та будь-якого $v \in (0, 1)$ має місце нерівність

$$f(\mathbf{x}, t, vu) > vf(\mathbf{x}, t, u), \quad \mathbf{x} \in \Omega, \quad t \in (0, t_0]. \quad (2.18)$$

Побудуємо для знаходження додатного розв’язку інтегрального рівняння (2.15) (і відповідно узагальненого розв’язку крайової задачі (2.11) – (2.13)) метод двобічних наближень.

Виділимо у конусі \mathcal{K}_+ для ізотонного оператора T_j інваріантний конусний відрізок $\langle v_j^0, w_j^0 \rangle$ за допомогою нерівностей (2.2):

$$\int_{\Omega} G(\mathbf{x}, \mathbf{s}) F_j(\mathbf{s}, v_j^0(\mathbf{s})) d\mathbf{s} \geq v_j^0(\mathbf{x}), \quad \forall \mathbf{x} \in \bar{\Omega},$$

$$\int_{\Omega} G(\mathbf{x}, \mathbf{s}) F_j(\mathbf{s}, w_j^0(\mathbf{s})) d\mathbf{s} \geq w_j^0(\mathbf{x}) \quad \forall \mathbf{x} \in \bar{\Omega},$$

які, якщо враховувати (2.14), можна записати наступним чином:

$$\varphi_j(\mathbf{x}) + \frac{1}{a^2} \int_{\Omega} G(\mathbf{x}, \mathbf{s}) f(\mathbf{s}, t_j, v_j^0(\mathbf{s})) d\mathbf{s} \geq v_j^0(\mathbf{x}), \quad \forall \mathbf{x} \in \bar{\Omega},$$

$$\varphi_j(\mathbf{x}) + \frac{1}{a^2} \int_{\Omega} G(\mathbf{x}, \mathbf{s}) f(\mathbf{s}, t_j, w_j^0(\mathbf{s})) d\mathbf{s} \leq w_j^0(\mathbf{x}), \quad \forall \mathbf{x} \in \bar{\Omega},$$

де позначено

$$\varphi_j(\mathbf{x}) = \frac{1}{a^2 \tau_{\Omega}} \int G(\mathbf{x}, \mathbf{s}) U_{j-1}(\mathbf{s}) d\mathbf{s}.$$

Очевидно, що $\varphi_j(\mathbf{x}) > 0$ для всіх $\mathbf{x} \in \Omega$ і $\varphi_j|_{\partial\Omega} = 0$.

Тепер за схемою (2.4), починаючи з кінців виділеного інваріантного відрізка $\langle v_j^0, w_j^0 \rangle$, сформуємо двобічний ітераційний процес:

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

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

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

який з урахуванням (2.14) набуде вигляду

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

$$w^{(k+1)}(\mathbf{x}) = \varphi_j(\mathbf{x}) + \frac{1}{a^2} \int_{\Omega} G(\mathbf{x}, \mathbf{s}) f(\mathbf{s}, t_j, w^{(k)}(\mathbf{s})) d\mathbf{s}, \quad k = 0, 1, 2, \dots, \quad (2.20)$$

$$v^{(0)}(\mathbf{x}) = v_j^0(\mathbf{x}), \quad w^{(0)}(\mathbf{x}) = w_j^0(\mathbf{x}). \quad (2.21)$$

З (2.19) і (2.20) маємо, що $v^{(k)}|_{\partial\Omega} = 0$, $w^{(k)}|_{\partial\Omega} = 0$, $k = 1, 2, \dots$, тобто всі наближення задовольняють однорідні крайові умови.

Через ізотонність оператора T_j та інваріантність конусного відрізка послідовність $\{v^{(k)}(\mathbf{x})\}$ є неспадною за конусом \mathcal{K}_+ , а $\{w^{(k)}(\mathbf{x})\}$ – незростаючою за конусом \mathcal{K}_+ , з нормальності якого випливає існування границь $v^*(\mathbf{x})$ і $w^*(\mathbf{x})$ цих послідовностей. При цьому, або $v^*(\mathbf{x}) < w^*(\mathbf{x})$, або $v^*(\mathbf{x}) = w^*(\mathbf{x})$. В останньому випадку $U_j^*(\mathbf{x}) := v^*(\mathbf{x}) = w^*(\mathbf{x})$ – єдиний додатний розв'язок крайової задачі (2.11) – (2.13) на конусному відрізку $\langle v_j^0, w_j^0 \rangle$.

Наведемо умови збіжності до єдиного неперервного додатного розв'язку $U_j^*(\mathbf{x})$ крайової задачі (2.11) – (2.13) послідовностей $\{v^{(k)}(\mathbf{x})\}$ і $\{w^{(k)}(\mathbf{x})\}$ в наступних теоремах [18].

Теорема 2.3. Нехай $\langle v_j^0, w_j^0 \rangle \subset K(u_0^j)$ – інваріантний конусний відрізок для ізотонного оператора T_j вигляду (2.16), $j = 1, \dots, m$, та для всіх $u > 0$ і $v \in (0, 1)$ справджується умова (2.18). Тоді ітераційний процес (2.19) – (2.21) двобічно збігається у нормі простору $\mathcal{C}(\bar{\Omega})$ до єдиного на конусному відрізку $\langle v_j^0, w_j^0 \rangle$ неперервного додатного розв'язку крайової задачі (2.11) – (2.13) $U_j^*(\mathbf{x})$ при кожному j , $j = 1, \dots, m$.

Теорема 2.4. Нехай $\langle v_j^0, w_j^0 \rangle$ – інваріантний конусний відрізок для ізотонного оператора T_j вигляду (2.16), $j = 1, \dots, m$, та існує на $(0, t_0]$ така

неперервна функція $L(t) > 0$, що для усіх таких чисел v, w , що $0 < v, w < M_0$, де $M_0 = \max_{j=1, \dots, m} \max_{\mathbf{x} \in \bar{\Omega}} w_j^0(\mathbf{x})$, і для усіх $\mathbf{x} \in \Omega$ справджується нерівність

$$|f(\mathbf{x}, t, w) - f(\mathbf{x}, t, v)| \leq L(t)|w - v|.$$

Якщо

$$\gamma = ML < 1,$$

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

$$L = \max_{j=1, \dots, m} L(t_j);$$

то ітераційний процес (2.19) – (2.21) двобічно збігається у нормі простору $C(\bar{\Omega})$ до єдиного на конусному відрізку $\langle v_j^0, w_j^0 \rangle$ неперервного додатного розв'язку крайової задачі (2.11) – (2.13) $U_j^*(\mathbf{x})$ при кожному $j, j = 1, \dots, m$. Відмітимо, що для j -ї задачі допустима оцінка

$$\|w^{(k+1)} - v^{(k+1)}\| \leq (L_j M)^{k+1} \|w_j^0 - v_j^0\|,$$

де $L_j = L(t_j)$.

Функцію

$$U_j^{(k)}(\mathbf{x}) = \frac{w^{(k)}(\mathbf{x}) + v^{(k)}(\mathbf{x})}{2} \quad (2.22)$$

вважатимемо наближеним розв'язком вихідної задачі (2.5) – (2.8) на j -му часовому шарі, отриманим як результат виконання k -ї ітерації двобічного ітераційного процесу (2.19) – (2.21).

Завдяки тому що послідовності $\{v^{(k)}(\mathbf{x})\}$ і $\{w^{(k)}(\mathbf{x})\}$ наближають точний розв'язок U_j^* двобічно, то на кожній k -й ітерації процесу (2.19) – (2.21) для похибки наближеного розв'язку (2.22) доступна апостеріорна оцінка:

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

яка дозволяє ввести наступний критерій закінчення ітераційного процесу розв'язання j -ї задачі, $j=1, \dots, m$: нехай $\varepsilon > 0$ – задана точність, тоді ітерації варто проводити до виконання нерівності

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

і з точністю ε можна прийняти $u^*(\mathbf{x}, t_j) = U_j^*(\mathbf{x}) \approx U_j^{(k_j)}(\mathbf{x})$.

Застосовуючи до крайових задач методу Роте на кожному часовому шарі запропонований метод двобічних наближень, отримаємо набір функцій

$$U_0(\mathbf{x}) = \varphi(\mathbf{x}), U_1^{(k_1)}(\mathbf{x}), U_2^{(k_2)}(\mathbf{x}), \dots, U_m^{(k_m)}(\mathbf{x}). \quad (2.23)$$

З теорем 2.3 – 2.4 випливає збіжність запропонованої схеми до розв'язку задачі (2.5) – (2.8) відповідно до загальних теорем збіжності метода Роте.

За отриманим набором функцій (2.23) за допомогою апарату теорії інтерфлетації [19] можна побудувати наближений розв'язок $u_m(\mathbf{x}, t)$ задачі (2.5) – (2.8) у вигляді функції, визначеної при всіх $\mathbf{x} \in \Omega$, $t \in [0, t_0]$. Він матиме

точність $O(\tau)$. Провівши повторно ітераційний процес з кроком $\frac{\tau}{2}$ та

отримавши наближений розв'язок $u_{2m}(\mathbf{x}, t)$, його можна уточнити відповідно до правила Рунге до порядку $O(\tau^2)$:

$$u(\mathbf{x}, t) = 2u_{2m}(\mathbf{x}, t) - u_m(\mathbf{x}, t).$$

Розглянемо деякі рекомендації, що спираються на властивості функції $f(\mathbf{x}, t, u)$ та можуть бути використані для побудови інваріантного конусного відрізка $\langle v_j^0, w_j^0 \rangle$ при чисельній реалізації запропонованого методу.

Якщо функція $f(\mathbf{x}, t, u)$ не визначена при $u=0$, то кінці конусного відрізка $\langle v_j^0, w_j^0 \rangle$ можна шукати у вигляді $v_j^0(\mathbf{x}) = \alpha_j u_0(\mathbf{x})$, $w_j^0(\mathbf{x}) = \beta_j u_0(\mathbf{x})$, де α_j і β_j ($0 < \alpha_j < \beta_j$) визначаються з

$$\alpha_j \leq \min_{\mathbf{x} \in \Omega} h_1^j(\mathbf{x}; \alpha_j), \quad \beta_j \geq \max_{\mathbf{x} \in \Omega} h_2^j(\mathbf{x}; \beta_j),$$

де позначено

$$h_1^j(\mathbf{x}; \alpha_j) = \frac{\varphi_j(\mathbf{x})}{u_0(\mathbf{x})} + \frac{1}{a^2} \int_{\Omega} \frac{G(\mathbf{x}, \mathbf{s})}{u_0(\mathbf{x})} f(\mathbf{s}, t_j, \alpha_j u_0(\mathbf{s})) ds,$$

$$h_2^j(\mathbf{x}; \beta_j) = \frac{\varphi_j(\mathbf{x})}{u_0(\mathbf{x})} + \frac{1}{a^2} \int_{\Omega} \frac{G(\mathbf{x}, \mathbf{s})}{u_0(\mathbf{x})} f(\mathbf{s}, t_j, \beta_j u_0(\mathbf{s})) ds.$$

У випадку коли функція $f(\mathbf{x}, t, u)$ визначена при $u=0$ і $f(\mathbf{x}, t, 0) \geq 0$ $\forall \mathbf{x} \in \bar{\Omega}$, $t \in (0, t_0]$, то конусний відрізок $\langle v_j^0, w_j^0 \rangle$ можна шукати у вигляді $v_j^0(\mathbf{x}) = 0$, $w_j^0(\mathbf{x}) = \beta_j$. Тоді перша з нерівностей (2.2) для оператора T_j вигляду (2.16) виконуватиметься завжди, а друга набуде вигляду

$$\varphi_j(\mathbf{x}) + \int_{\Omega} G(\mathbf{x}, \mathbf{s}) f(\mathbf{s}, t_j, \beta_j) ds \leq \beta_j, \quad \forall \mathbf{x} \in \bar{\Omega},$$

що дозволяє знайти β_j . Використовуючи введене раніше позначення $M = \max_{\mathbf{x} \in \bar{\Omega}} u_0(\mathbf{x})$ її можна записати у наступному вигляді

$$\max_{\mathbf{x} \in \bar{\Omega}} \varphi_j(\mathbf{x}) + M \max_{\mathbf{x} \in \bar{\Omega}} f(\mathbf{x}, t_j, \beta_j) \leq \beta_j. \quad (2.24)$$

2.3 Застосування методів Роте та двобічних наближень на основі використання функції Гріна при дослідженні процесів самозаймання

Розглянемо в обмеженій області $\bar{\Omega} \subset \mathbb{R}^2$ двовимірну нелінійну початково-крайову задачу для рівняння теплопровідності

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = A \Delta \theta + B e^{\theta}, \quad \mathbf{x} \in \Omega, \quad t \in (0, t_0], \quad (2.25)$$

$$\theta(\mathbf{x}, t) > 0, \quad \mathbf{x} \in \Omega, \quad t \in (0, t_0], \quad (2.26)$$

$$\theta(\mathbf{x}, 0) = 0, \quad \mathbf{x} \in \bar{\Omega}, \quad (2.27)$$

$$\theta(\mathbf{x}, t)|_{\partial\Omega} = 0, \quad t \in [0, t_0], \quad (2.28)$$

де $\mathbf{x} = (x_1, x_2)$;

$A > 0$, $B > 0$ – сталі, що відображають фізико-хімічні властивості насипу вугілля;

$t_0 > 0$ – обраний час моделювання.

Задача (2.25) – (2.28) є двовимірною математичною моделлю зміни температури у насипі вугілля (якщо розглядається його переріз з припущенням про рівномірність розподілу температури вздовж третього виміру) при процесові самозаймання насипу вугілля. Умова (2.26) має сенс в контексті розгляду функції зміни температури при екзотермічній реакції.

Складаємо задачу (2.11) – (2.13), що відповідає задачі (2.25) – (2.28) для j -го часового шару:

$$-\Delta \Theta_j + \frac{1}{A\tau} \Theta_j = \frac{1}{A\tau} \Theta_{j-1} + \frac{B}{A} e^{\Theta_j} \Theta_j(\mathbf{x}) > 0, \mathbf{x} \in \Omega, \quad (2.29)$$

$$\Theta_j(\mathbf{x}) > 0, \mathbf{x} \in \Omega, \quad (2.30)$$

$$\Theta_j(\mathbf{x}, t) \Big|_{\partial\Omega} = 0, \quad (2.31)$$

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

$$\Theta_0(x) = 0,$$

та еквівалентне їй інтегральне рівняння Гаммерштейна (2.15):

$$\Theta_j(\mathbf{x}) = \int_{\Omega} G_j(\mathbf{x}, \mathbf{s}) \left(\frac{1}{A\tau} \Theta_{j-1}(\mathbf{s}) + \frac{B}{A} e^{\Theta_j(\mathbf{s})} \right) ds, \quad (2.32)$$

де $G_j(\mathbf{x}, \mathbf{s})$ – функція Гріна першої крайової задачі для оператора Гельмгольца

$$-\Delta u + \frac{1}{A\tau} u \quad (A > 0) \text{ на } \bar{\Omega}.$$

Зафіксуємо надалі j та розглянемо на j -му часовому шарі рівняння (2.32) у банаховому просторі $C(\bar{\Omega})$ з введеною конусом \mathcal{K}_+ напівупорядкованістю та нормою, що задається як $\|u\| = \max_{\mathbf{x} \in \bar{\Omega}} |u(\mathbf{x})|$.

Введемо у розгляд відповідно до (2.16) оператор

$$T(u)(\mathbf{x}) = \int_{\Omega} G(\mathbf{x}, \mathbf{s}) \left(\frac{1}{A\tau} \Theta_{j-1}(\mathbf{s}) + \frac{B}{A} e^{u(\mathbf{s})} \right) ds,$$

ізотонний через те, що функція $F(\mathbf{x}, u) = \frac{1}{A\tau} \Theta_{j-1}(\mathbf{x}) + \frac{B}{A} e^u$ є неперервною,

монотонно зростаючою за u (оскільки похідна $F'(\mathbf{x}, u) = \frac{B}{A} e^u$ додатна при $u > 0$) та $F(\mathbf{x}, u) > 0$ при $\mathbf{x} \in \bar{\Omega}$, $u > 0$.

Виділимо інваріантний конусний відрізок для оператора T_j . Згідно з рекомендаціями, наведеними в попередньому пункті, його варто шукати у вигляді $\langle v_j^0, w_j^0 \rangle = \langle 0, \beta_j \rangle$, оскільки функція $f(u) = \frac{B}{A} e^u$ визначена при $u = 0$, причому $f(0) = \frac{B}{A} > 0$. Для знаходження правого кінця конусного відрізка $\beta_j > 0$ після введення $u_0(\mathbf{x}) = \int_{\Omega} G(\mathbf{x}, \mathbf{s}) ds$ відповідно до (2.24) маємо нерівність

$$\max_{\mathbf{x} \in \Omega} \varphi_j(\mathbf{x}) + \frac{B}{A} M e^{\beta} \leq \beta, \quad (2.33)$$

де $\varphi_j(\mathbf{x}) = \frac{1}{A\tau} \int_{\Omega} G(\mathbf{x}, \mathbf{s}) \Theta_{j-1}(\mathbf{s}) ds$;

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

Отже, можемо побудувати ітераційний процес (2.19) – (2.21) для крайової задачі (2.29) – (2.31) на j -му часовому шарі:

$$v^{(k+1)}(\mathbf{x}) = \varphi_j(\mathbf{x}) + \frac{B}{A_{\Omega}} \int G(\mathbf{x}, \mathbf{s}) e^{v^{(k)}(\mathbf{s})} ds, \quad k = 0, 1, 2, \dots, \quad (2.34)$$

$$w^{(k+1)}(\mathbf{x}) = \varphi_j(\mathbf{x}) + \frac{B}{A_{\Omega}} \int G(\mathbf{x}, \mathbf{s}) e^{w^{(k)}(\mathbf{s})} ds, \quad k = 0, 1, 2, \dots, \quad (2.35)$$

$$v^{(0)}(\mathbf{x}) = 0, \quad w^{(0)}(\mathbf{x}) = \beta_j, \quad (2.36)$$

з умовою завершення його проведення

$$\frac{1}{2} \max_{\mathbf{x} \in \Omega} (w^{(k)}(\mathbf{x}) - v^{(k)}(\mathbf{x})) < \varepsilon, \quad (2.37)$$

де $\varepsilon > 0$ – задана точність.

Розглянемо питання його збіжності. Для цього перевіримо умови, наведені в теоремах 2.3 та 2.4.

Почнемо з теореми 2.3. Запишемо умову (2.18) при $f(u) = \frac{B}{A} e^u$:

$$\frac{B}{A} e^{vu} > v \frac{B}{A} e^u, \quad \mathbf{x} \in \Omega, \quad t \in (0, t_0], \quad v \in (0, 1),$$

звідки логарифмуванням отримуємо

$$u < \frac{\ln \frac{1}{v}}{1-v}, \quad \mathbf{x} \in \Omega, \quad t \in (0, t_0], \quad v \in (0, 1). \quad (2.38)$$

Права частина цієї нерівності залежить лише від v , тоді враховуючи що

$$\inf_{v \in (0, 1)} \frac{\ln \frac{1}{v}}{1-v} = 1,$$

то замість нерівності (2.38) можна вимагати виконання

$$u < 1, \quad \mathbf{x} \in \Omega, \quad t \in (0, t_0]. \quad (2.39)$$

Повертаючись до виділеного інваріантного конусного відрізка, цю нерівність можна розглянути при $u \in \langle v_j^0, w_j^0 \rangle = \langle 0, \beta_j \rangle$. Тоді нерівність (2.39) виконуватиметься для всіх $0 < u \leq \beta_j$ якщо $0 < \beta_j < 1$. Отже, достатньою умовою

збіжності ітераційного процесу (2.34) – (2.36) є виконання нерівності

$$\beta_j < 1. \quad (2.40)$$

Виконання умови (2.40) для кожного $j=1, 2, \dots, m$, і виконання умов теореми 2.3 є еквівалентними.

Перейдемо до перевірки умов теореми 2.4 при $f(u) = \frac{B}{A}e^u$. Розглянемо

$$|f(w) - f(v)| = \left| \frac{B}{A}e^w - \frac{B}{A}e^v \right|.$$

З теореми Лагранжа, враховуючи, що $f'(u) = \frac{B}{A}e^u$, отримаємо

$$|f(w) - f(v)| = \frac{B}{A}e^\xi |w - v| \leq \frac{B}{A}e^{\beta_j} |w - v|,$$

оскільки $\xi \in \langle 0, \beta_j \rangle$. Таким чином, вибір $L_j = \frac{B}{A}e^{\beta_j}$ в нерівності

$$|f(w) - f(v)| \leq L_j |w - v|$$

забезпечує її виконання для всіх $v, w \in \langle 0, \beta_j \rangle$.

Отже, достатньою умовою збіжності ітераційного процесу (2.34) – (2.36) є виконання нерівності

$$M \cdot \frac{B}{A}e^{\beta_j} < 1. \quad (2.41)$$

Виконання умови (2.41) для кожного $j=1, 2, \dots, m$, і виконання умов теореми 2.4 є еквівалентними.

Висновки за розділом 2

У розділі 2 розглянуто основні теоретичні відомості з теорії операторних рівнянь, що необхідні при застосуванні методу двобічних наближень.

Розглянуто початково-крайову задачу для напівлінійного двовимірного рівняння теплопровідності, яка згідно з методом Роте була зведена до послідовності крайових задач, кожна з яких була зведена до операторного рівняння Гаммерштейна $u = T(u)$, для якого було описано способи знаходження інваріантного конусного відрізка, сформульовано ітераційний процес методу двобічних наближень та наведено умови його збіжності.

Це було перенесено на початково-крайову задачу, що є математичною моделлю процесу самозаймання, до розв'язання якої застосували метод Роте у поєднанні з методом двобічних наближень: вихідна задача замінена послідовністю крайових задач, кожна з яких була зведена до рівняння Гаммерштейна, для оператора якого побудовано інваріантний конусний відрізок та ітераційний процес двобічних наближень, для якого виведено умови збіжності.

3 ПРОГРАМНА РЕАЛІЗАЦІЯ

3.1 Система комп'ютерної алгебри Mathematica 13.3

Розвиток електронних обчислювальних машин та розширення області їх застосування не оминули і математику, створивши необхідність у інструментах взаємодії між машиною та науковцями у тій формі, що буде зручніша для останніх. Вирішенням цієї проблеми стали системи комп'ютерної алгебри, ідеєю яких є надання можливості задавати та проводити автоматизовано математичні операції, використовуючи для цього вже сформовані в науці терміни та позначення. Одною із таких систем є Wolfram Mathematica. Випущена ще в липні 1988 року, вона продовжила оновлятися та в липні 2023 року отримала оновлення до версії 13.3, що накопичила великий список функцій та можливостей [20].

Система комп'ютерної алгебри Wolfram Mathematica використовує власну мову програмування Mathematica, що до можливостей, властивих традиційним мовам програмування, таких як процедурне програмування і наявність циклів та масивів, додає символіні перетворення та чисельні обчислення. Ця властивість забезпечує гнучкість застосувань цього програмного забезпечення при проведенні досліджень, зокрема, при математичному моделюванні, оскільки дозволяє закладати при плануванні програмної реалізації використання окрім прямого обчислення по завчасно підготовленим дослідником даним використання аналітичних маніпуляцій, наприклад, з математичними функціями, що будуть задані пізніше. Програма в Wolfram Mathematica 13.3 подається у вигляді інтерактивного документу з окремими комірками, що можуть запускатися незалежно одна від одної. Якщо код в комірці має результати для виведення, вони будуть відображені в документі. Окрім цього, у Wolfram Mathematica 13.3 реалізовано широкий набір засобів для візуалізації, зокрема, необхідні для ілюстрації результатів дослідження, побудова графіків, ліній рівня функції та подання інформації у вигляді таблиць. Всі можливості задокументовано з прикладами, що дозволяє пришвидшити вивчення дослідником мови Mathematica.

Починаючи з версії 7.0 Wolfram Mathematica підтримує паралельні обчислення, що дозволяють пришвидшити обчислення при використанні багатоядерних процесорів, що частково вирішило головний недолік цієї системи комп'ютерної алгебри, порівняно з іншими – повільне виконання коду, але потребує використання спеціальних функцій при програмуванні.

3.2 Алгоритм розв'язання задачі математичного моделювання процесів самозаймання

Наведемо алгоритм застосування методу Рунге в комбінації з методом двобічних наближень до знаходження розв'язку двовимірної задачі математичного моделювання процесів самозаймання, спираючись на п. 2.3:

а) обрати час моделювання $t_0 > 0$, крок дискретизації часу τ та необхідну точність наближеного розв'язку ε ;

б) ввести з кроком τ на інтервалі моделювання сітку та сформулювати для її вузлів відповідні крайові задачі;

в) послідовно розв'язати методом двобічних наближень крайову задачу для кожного часового шару j , $j = 1, 2, \dots, m$:

1) побудувати інваріантний конусний відрізок $\langle 0, \beta_j \rangle$, визначивши його правий кінець β_j з (2.33);

2) перевірити двобічну збіжність ітераційного процесу за допомогою умов (2.40) або (2.41);

3) побудувати послідовності верхніх та нижніх наближень за схемою (2.34) – (2.36) з умовою припинення ітераційного процесу (2.37);

4) прийняти функцію $\theta^*(\mathbf{x}, t_j) \approx \Theta_j^{(k_j)}(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \left(w^{(k_j)}(\mathbf{x}) + v^{(k_j)}(\mathbf{x}) \right)$ з точністю ε як розв'язок задачі вздовж прямої $t = t_j$;

г) за набором функцій $\Theta_0(\mathbf{x}) = 0$, $\Theta_1^{(k_1)}(\mathbf{x})$, $\Theta_2^{(k_2)}(\mathbf{x})$, ..., $\Theta_m^{(k_m)}(\mathbf{x})$ побудувати неперервний наближений розв'язок вихідної задачі.

3.3 Опис програми

Програма виконана в системі комп'ютерної алгебри Wolfram Mathematica 13.3 у вигляді електронного блокноту, що оновлюється при виконанні коду та дозволяє інтерактивну взаємодію з ним. Код програми наведено в додатку А.

Програму поділено на чотири блоки:

а) блок «Assignment of Parameters Values», в якому задаються всі необхідні задачі параметри: значення A та B , час моделювання $t_0 > 0$, крок сітки τ , область, в якій розглядається задача, необхідні точність наближень ε тощо;

б) у блоці «Green's function definition» задається функція Гріна для досліджуваної задачі;

в) блок «Preparation for iterative processes» містить підготовку до ітераційного процесу на кожному часовому шарі, а саме: визначення правого кінця конусного відрізка β_j , перевірку умов збіжності ітераційного процесу методу двобічних наближень тощо;

в) у блоці «Two-sided iterative process» відбуваються обчислення ітераційного процесу методу двобічних наближень;

г) блок «Results preparation and output» складається з підготовки для презентації даних, отриманих як результат виконання попередніх блоків, та власне їх вивід.

Висновки за розділом 3

У третьому розділі розроблено алгоритм застосування методу Роте у поєднанні з методом двобічних наближень до розв'язання двовимірної початково-крайової задачі для напівлінійного рівняння теплопровідності, що

виникає при моделюванні процесів самозаймання. Для його реалізації було обрано систему комп'ютерної алгебри Mathematica 13.3, описано переваги цієї системи. Розроблена програма розбита по блокам, описано функціональне призначення кожного з них.

4 РЕЗУЛЬТАТИ ОБЧИСЛЮВАЛЬНОГО ЕКСПЕРИМЕНТУ ТА ЇХ АНАЛІЗ

Для задачі, що відповідає (2.25) – (2.28), та має вигляд

$$\frac{\partial u}{\partial t} = A\Delta u + Be^u, \quad \mathbf{x} \in \Omega, \quad t \in (0, t_0], \quad (4.1)$$

$$u(\mathbf{x}, t) > 0, \quad \mathbf{x} \in \Omega, \quad t \in (0, t_0], \quad (4.2)$$

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

$$u(\mathbf{x}, t)|_{\partial\Omega} = 0, \quad t \in [0, t_0], \quad (4.4)$$

проведемо обчислювальний експеримент, обравши для розгляду три області: кругову з радіусом $R = 1$

$$\Omega = \{(x_1, x_2) : x_1^2 + x_2^2 \leq 1\}, \quad (4.5)$$

півкруг з радіусом $R = \sqrt{2}$

$$\Omega = \{(x_1, x_2) : x_1^2 + x_2^2 \leq 2, x_2 \geq 0\} \quad (4.6)$$

та прямокутну область зі сторонами $a = \pi$ та $b = 1$

$$\Omega = \{(x_1, x_2) : 0 \leq x_1 \leq \pi, 0 \leq x_2 \leq 1\}. \quad (4.7)$$

Цей вибір виходить з практичних міркувань щодо фізичного сенсу задачі – моделювання розподілу температури у насипі вугілля: кожна область має однакову міру $\mu(\Omega) = \pi$, тому відповідні контейнери для збереження вугілля, перерізами яких є ці області, при однаковій довжині (що має сенс для транспортних ємностей) вміщатимуть однаковий об'єм цього матеріалу. Отже,

проведення такого обчислювального експерименту дає можливість дослідити вплив геометричної форми насипу на накопичення в ньому тепла при процесі самозаймання. Приклади насипів вугілля, перерізи яких описуються областями (4.5), (4.6) та (4.7) проілюстровано на рис. 1.1, рис. 4.1 та рис. 4.2 відповідно (зліва зображено насип; червоним пунктиром виділено $\partial\Omega$; справа зображено Ω).

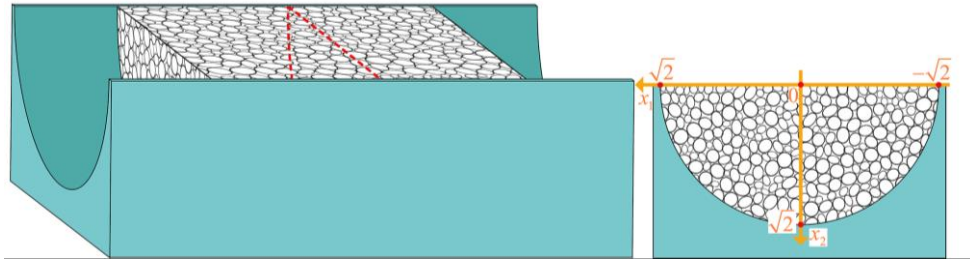


Рисунок 4.1 – Зображення насипу вугілля циліндричної форми та його перерізу, що описується областю (4.6)

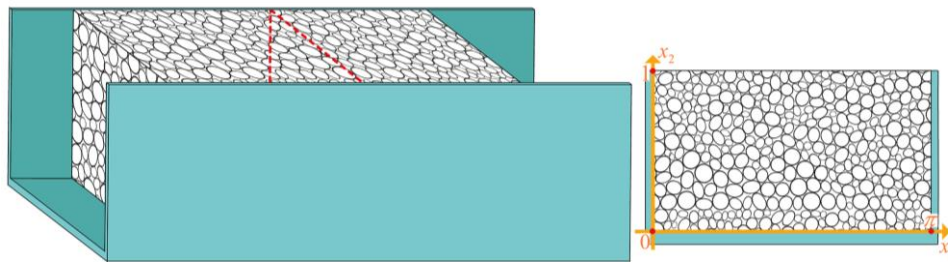


Рисунок 4.2 – Зображення насипу вугілля циліндричної форми та його перерізу, що описується областю (4.7)

Покладемо для подальшого використання час моделювання $t_0 = 1$, параметри $A = 1$, $B = \frac{5}{4}$ та крок сітки на часовому інтервалі $\tau = \frac{1}{3}$.

4.1 Обчислювальний експеримент для кругової області

Розглянемо задачу (4.1) – (4.4) в круговій області (4.5). Функція Гріна для кругової області з радіусом R має вигляд

$$G(r, \varphi, \rho, \psi) = \frac{2}{\pi R^2} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{J_n(r\sqrt{\lambda_{nm}}) J_n(\rho\sqrt{\lambda_{nm}}) \cos n(\varphi - \psi)}{(1 + \delta_{n0}) [J'_n(\mu_{nm})]^2 (\lambda_{nm} + \kappa^2)},$$

де $J_n(\mu)$ – функція Бесселя;

μ_{nm} – m -й додатний корінь рівняння $J_n(\mu) = 0$;

$$\delta_{n0} = \begin{cases} 1, & n = 0, \\ 0, & n = 1, 2, \dots; \end{cases}$$

$$\lambda_{nm} = \frac{\mu_{nm}^2}{R^2}.$$

Тоді для області (4.5) з радіусом $R = 1$, враховуючи обрані параметри,

$$G(r, \varphi, \rho, \psi) = \frac{2}{\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{J_n(r\sqrt{\lambda_{nm}}) J_n(\rho\sqrt{\lambda_{nm}}) \cos n(\varphi - \psi)}{(1 + \delta_{n0}) (\lambda_{nm} + 3) [J'_n(\mu_{nm})]^2}.$$

Тут полярні (r, φ) , (ρ, ψ) та декартові (x_1, x_2) , (s_1, s_2) координати точок \mathbf{x} , \mathbf{s} пов'язані відповідно як $x_1 = r \cos \varphi$, $x_2 = r \sin \varphi$, $s_1 = \rho \cos \psi$, $s_2 = \rho \sin \psi$.

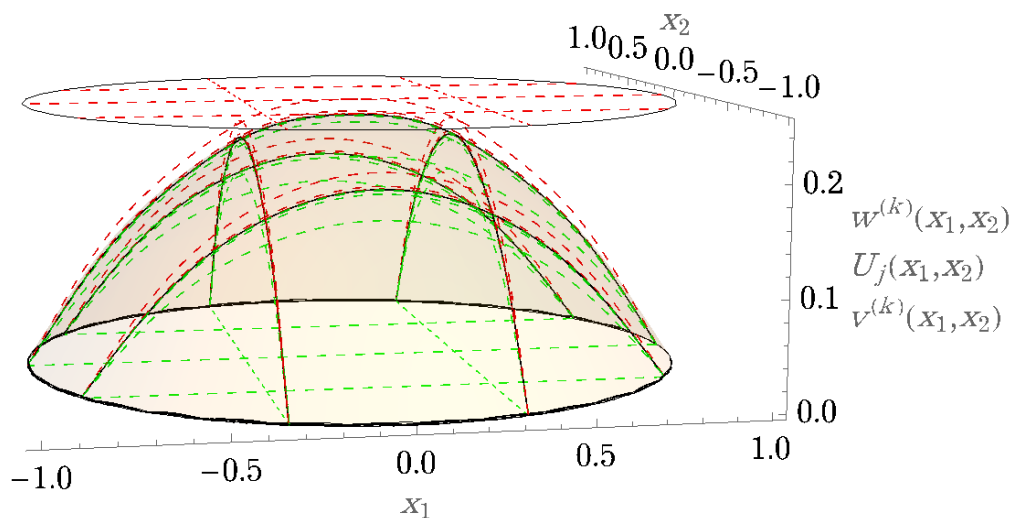
Оскільки $t_0 = 1$, а $\tau = \frac{1}{3}$, то розв'язання задачі (4.1) – (4.4) зводиться до послідовного розв'язання $m=3$ задач вигляду (2.29) – (2.31). Дані щодо збіжності методу двобічних наближень на кожному часовому шарі $t = \tau \cdot j$, $j = 1, 2, 3$, наведено в таблиці 4.1, а саме кількість виконаних ітерацій, значення правого кінця конусного відрізка $\langle 0, \beta_j \rangle$ та величину $M \cdot \frac{B}{A} e^{\beta_j}$, що використовуються для перевірки умов (2.40) і (2.41). Також вказано значення лівої частини нерівності (2.37) на останній ітерації, що є оцінкою похибки побудованого наближення на кожному часовому шарі, і наведено середнє значення відношень оцінки похибки на поточній ітерації до оцінки похибки з попередньої $\frac{\varepsilon^{(k+1)}}{\varepsilon^{(k)}}$, яке є показником збіжності ітераційного процесу.

Таблиця 4.1 – Дані про кількість ітерацій, значення β_j , величину $M \frac{B}{A} e^{\beta_j}$,

оцінку похибки та показник збіжності для круга
радіуса $R = 1$

j	Кількість ітерацій	β_j	$M \frac{B}{A} e^{\beta_j}$	Оцінка похибки	$\frac{\varepsilon^{(k+1)}}{\varepsilon^{(k)}}$
1	5	0,251314	0,251314	$0,29 \cdot 10^{-4}$	0,188
2	5	0,372795	0,283775	$0,64 \cdot 10^{-4}$	0,203
3	5	0,426604	0,299463	$0,87 \cdot 10^{-4}$	0,211

Як бачимо з табл. 4.1, умови збіжності ітераційного процесу методу двобічних наближень (2.40) і (2.41) виконано, а збіжність досягнута за 5 ітерацій на кожному часовому шарі. Значення показника збіжності вказує на геометричну збіжність побудованих послідовностей наближень з показником $\approx 0,201$. Двобічний характер збіжності проілюстровано на рис. 4.3, де наведено ітераційний процес на першому часовому шарі $t = \tau = \frac{1}{3}$ (червоним пунктиром зображено верхні наближення $\{w^{(k)}(\mathbf{x})\}$, чорною лінією з напівпрозорим жовтим – наближений розв’язок $U_1(\mathbf{x})$, зеленим пунктиром – верхні наближення $\{v^{(k)}(\mathbf{x})\}$).

Рисунок 4.3 – Графіки $\{w^{(k)}(\mathbf{x})\}$, $U_1(\mathbf{x})$ та $\{v^{(k)}(\mathbf{x})\}$ для круга радіуса $R = 1$

З рис. 4.5, на якому наведено наближення $U_j(\mathbf{x})$, $j = \overline{0,3}$, можна зробити висновок про зростання розв'язку зі збільшенням номеру часового шару.

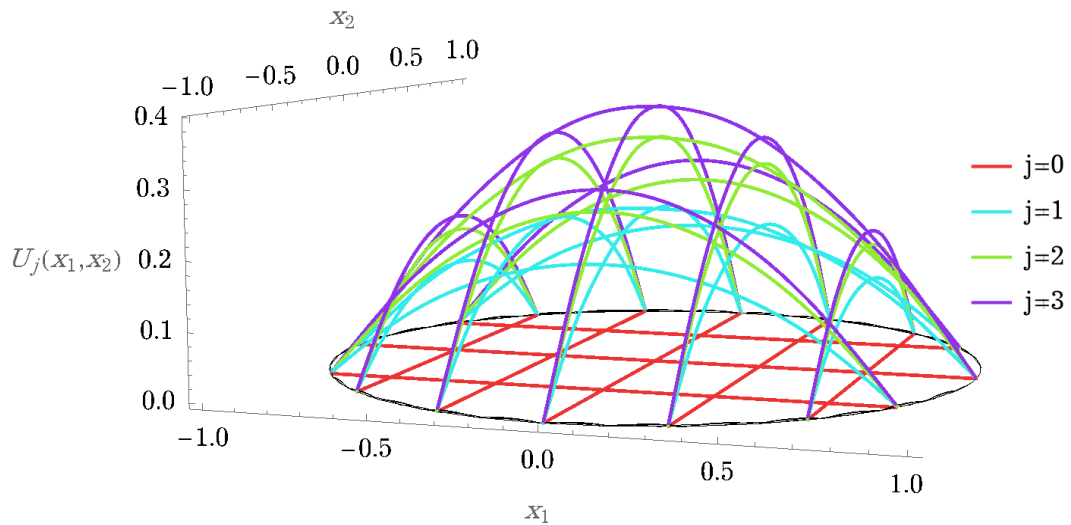


Рисунок 4.5 – Графіки наближених розв'язків $U_j(\mathbf{x})$ до розв'язку

задачі (4.1) – (4.4) для круга радіуса $R = 1$ на часових шарах $t = \frac{1}{3}j$, $j = 0, 1, 2, 3$

Це підтверджується даними, що наведені в табл. 4.2: максимальне значення кожного наближення, аргумент максимізації, різниця між максимумами наближень на поточному та попередньому часовому шарі, значення інтегралу наближення по області (4.5), поділене на міру області,

$\bar{u}_j = \frac{1}{\mu(\Omega)} \int_{\Omega} U_j(\mathbf{x}) ds$, що відображає середнє значення наближення, та різниця

між цими значеннями на поточному та попередньому часових шарах $\bar{u}_j - \bar{u}_{j-1}$.

Повертаючись до фізичного сенсу задачі (4.1) – (4.4), такі значення як максимум та інтеграл наближення, розділений на міру області, відображають відповідно максимально накопичене в точці перерізу насипу тепло та середнє його значення на цьому часовому шарі. Як бачимо, різниця цих значень на поточному та попередньому шарі зменшується зі збільшенням номеру шару, тобто при обраних параметрах з часом зменшується кількість накопиченого тепла за однакові часові проміжки.

Таблиця 4.2 – Дані про максимум $U_j(\mathbf{x})$, $j = \overline{0,3}$, аргумент максимізації та різницю максимумів $U_j(\mathbf{x})$ і $U_{j-1}(\mathbf{x})$, значення \bar{u}_j та $\bar{u}_j - \bar{u}_{j-1}$, $j = \overline{1,3}$, для круга радіуса $R = 1$

j	$\max_{\mathbf{x} \in \Omega} U_j(\mathbf{x})$	$\arg \max_{\mathbf{x} \in \Omega} U_j(\mathbf{x})$	$\max_{\mathbf{x} \in \Omega} U_j(\mathbf{x}) - \max_{\mathbf{x} \in \Omega} U_{j-1}(\mathbf{x})$	\bar{u}_j	$\bar{u}_j - \bar{u}_{j-1}$
0	0	Ω	–	0	–
1	0,236553	(0;0)	0,236553	0,122866	0,122866
2	0,345951	(0;0)	0,109398	0,171881	0,049016
3	0,393307	(0;0)	0,047356	0,192370	0,020489

Теплокарти для розв'язку задачі (4.1) – (4.4) $u(\mathbf{x}, t)$ в області (4.5), отриманого інтерполяцією вбудованими методами математичного пакету Mathematica 13.3 на основі побудованого каркасу наближень $U_j(\mathbf{x})$, $j = \overline{0,3}$, по часовій змінній у вузлах введеної сітки, зображено на рис. 4.6.

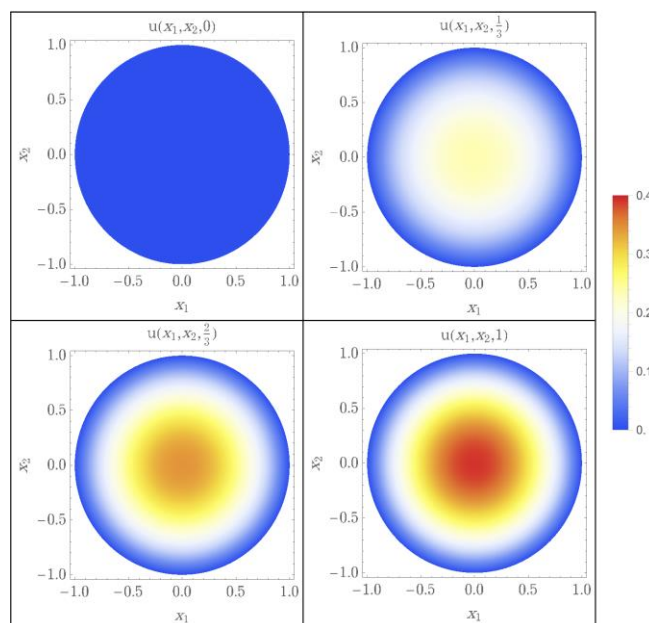


Рисунок 4.6 – Графіки теплокарт для наближеного розв'язку $u(\mathbf{x}, t)$

задачі (4.1) – (4.4) для круга радіуса $R = 1$ при $t = \frac{1}{3} j$, $j = \overline{0,3}$

Як бачимо з рис. 4.6, акумуляція тепла відбувається біля центроїда області (4.5), що підкріплюється значеннями аргументу максимізації наближень в табл. 4.2.

4.2 Обчислювальний експеримент для півкругової області

Перейдемо до розгляду задачі (4.1) – (4.4) в півкруговій області (4.6). Враховуючи її радіус $R = \sqrt{2}$ та обрані параметри, функція Гріна для півкруга з радіусом R

$$G(r, \varphi, \rho, \psi) = \frac{4}{\pi R^2} \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{J_n(r\sqrt{\lambda_{nm}}) J_n(\rho\sqrt{\lambda_{nm}}) \sin n\varphi \sin n\psi}{[J'_n(\mu_{nm})]^2 \left(\lambda_{nm} + \frac{1}{A\tau} \right)}$$

набуде вигляду

$$G(r, \varphi, \rho, \psi) = \frac{2}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{J_n(r\sqrt{\lambda_{nm}}) J_n(\rho\sqrt{\lambda_{nm}}) \sin n\varphi \sin n\psi}{[J'_n(\mu_{nm})]^2 (\lambda_{nm} + 3)}.$$

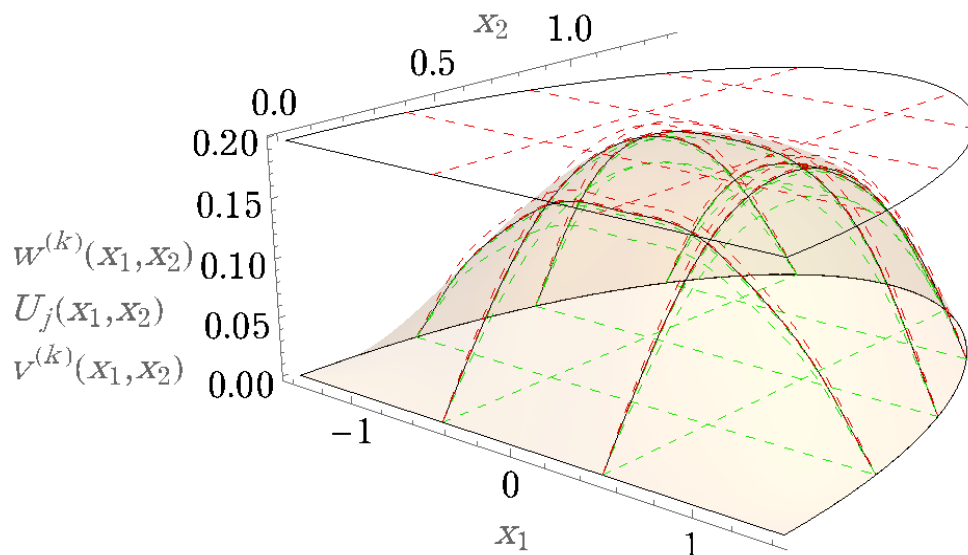
В табл. 4.3 наведено дані щодо збіжності методу двобічних наближень на кожному часовому шарі $t = \tau \cdot j$, $j = 1, 2, 3$, а саме: кількість виконаних ітерацій, значення правого кінця конусного відрізка $\langle 0, \beta_j \rangle$ та величину $M \cdot \frac{B}{A} e^{\beta_j}$, що використовуються для перевірки умов (2.40) і (2.41). Також вказано оцінку похибки побудованого наближення на кожному часовому шарі та наведено показник збіжності ітераційного процесу. Як бачимо, умови збіжності ітераційного процесу методу двобічних наближень (2.40) і (2.41) виконано, а для досягнення збіжності виконано не більше 5 ітерацій на кожному часовому шарі. Значення показника збіжності вказує на геометричну збіжність побудованих послідовностей наближень з показником $\approx 0,163$.

Таблиця 4.3 – Дані про кількість ітерацій, значення β_j , величину $M \frac{B}{A} e^{\beta_j}$,

оцінку похибки та показник збіжності для півкруга
радіуса $R = \sqrt{2}$

j	Кількість ітерацій	β_j	$M \frac{B}{A} e^{\beta_j}$	Оцінка похибки	$\frac{\varepsilon^{(k+1)}}{\varepsilon^{(k)}}$
1	4	0,197228	0,197228	$0,61 \cdot 10^{-4}$	0,158
2	5	0,275258	0,213234	$0,16 \cdot 10^{-4}$	0,163
3	5	0,303276	0,219293	$0,20 \cdot 10^{-4}$	0,167

Двобічний характер побудованих послідовностей наближень проілюстровано на рис. 4.7, де наведено ітераційний процес на першому часовому шарі $t = \tau = \frac{1}{3}$ (червоним пунктиром зображено верхні наближення $\{w^{(k)}(\mathbf{x})\}$, чорною лінією з напівпрозорим жовтим – наближений розв'язок $U_1(\mathbf{x})$, зеленим пунктиром – верхні наближення $\{v^{(k)}(\mathbf{x})\}$).

Рисунок 4.7 – Графіки $\{w^{(k)}(\mathbf{x})\}$, $U_1(\mathbf{x})$ та $\{v^{(k)}(\mathbf{x})\}$ для півкруга радіуса $R = \sqrt{2}$

На рис. 4.8 наведено графіки наближень $U_j(\mathbf{x})$, $j = \overline{0,3}$. За ними можна зробити висновок про зростання наближення зі збільшенням номеру часового шару. Це також підтверджується даними, що наведені в табл. 4.4: максимальне значення кожного наближення, аргумент максимізації, різниця між максимумами наближень на поточному та попередньому часовому шарі, значення інтегралу наближення по області (4.6), поділене на міру області, $\bar{u}_j = \frac{1}{\mu(\Omega)} \int_{\Omega} U_j(\mathbf{x}) ds$, та різниця між цими значеннями на поточному та попередньому часових шарах $\bar{u}_j - \bar{u}_{j-1}$. Як бачимо з табл. 4.4, різниця на поточному та попередньому шарі таких значень як максимум та інтеграл наближення, розділений на міру області, зменшується зі збільшенням номеру шару, тому у контексті фізичного сенсу задачі (4.1) – (4.4), можемо зробити висновок, що при обраних параметрах з часом зменшується кількість накопиченого тепла за однакові часові проміжки.

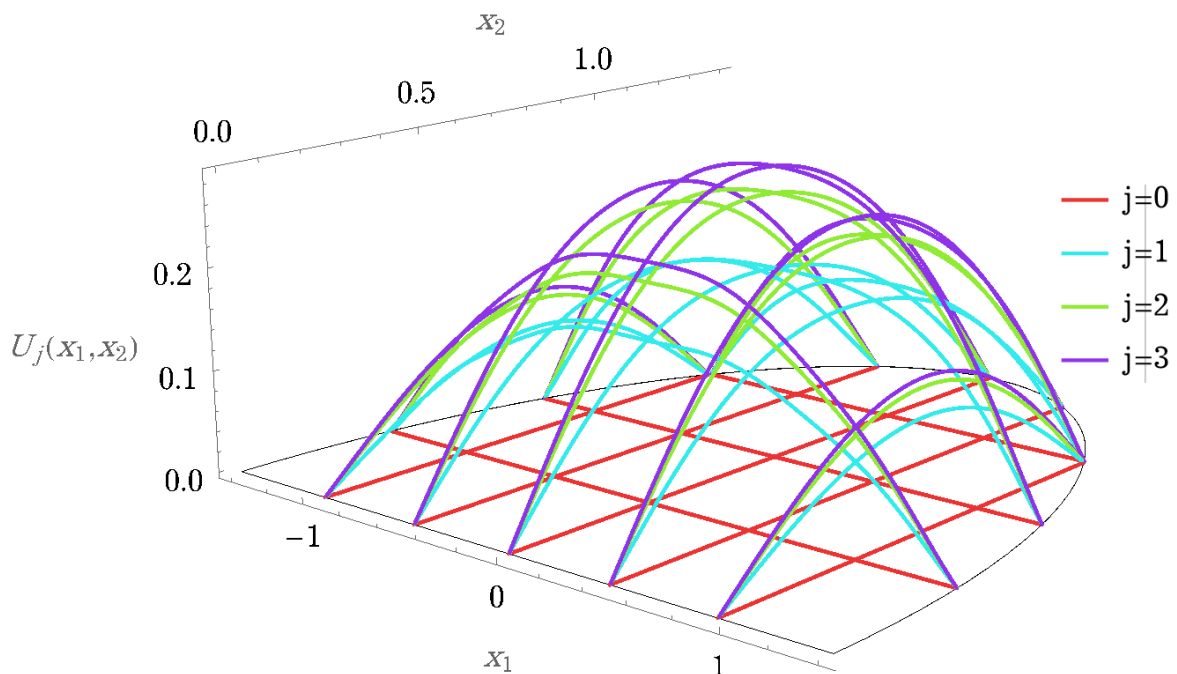


Рисунок 4.8 – Графіки наближених розв’язків $U_j(\mathbf{x})$ до розв’язку

задачі (4.1) – (4.4) на часових шарах $t = \frac{1}{3}j$, $j = 0, 1, 2, 3$

для півкруга радіуса $R = \sqrt{2}$

Таблиця 4.4 – Дані про максимум $U_j(\mathbf{x})$, $j = \overline{0,3}$, аргумент максимізації та різницю максимумів $U_j(\mathbf{x})$ і $U_{j-1}(\mathbf{x})$, значення \bar{u}_j та $\bar{u}_j - \bar{u}_{j-1}$, $j = \overline{1,3}$, для півкруга радіуса $R = \sqrt{2}$

j	$\max_{\mathbf{x} \in \Omega} U_j(\mathbf{x})$	$\arg \max_{\mathbf{x} \in \Omega} U_j(\mathbf{x})$	$\max_{\mathbf{x} \in \Omega} U_j(\mathbf{x}) - \max_{\mathbf{x} \in \Omega} U_{j-1}(\mathbf{x})$	\bar{u}_j	$\bar{u}_j - \bar{u}_{j-1}$
0	0	Ω	–	0	–
1	0,189873	(0;0,644555)	0,189873	0,096102	0,096102
2	0,262983	(0;0,655525)	0,073110	0,127208	0,031106
3	0,288949	(0;0,658226)	0,025966	0,137668	0,010460

Теплокарти для розв'язку задачі (4.1) – (4.4) $u(\mathbf{x}, t)$ в області (4.6), отриманого інтерполяцією вбудованими методами математичного пакету Mathematica 13 на основі побудованого каркасу наближень $U_j(\mathbf{x})$, $j = \overline{0,3}$, по часовій змінній у вузлах введеної сітки, зображено на рис. 4.9.

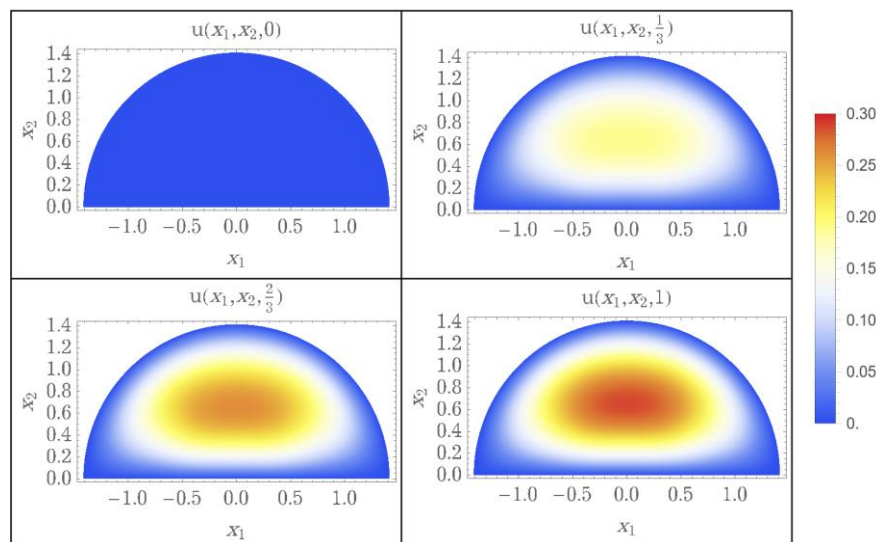


Рисунок 4.9 – Графіки теплокарт для наближеного розв'язку $u(\mathbf{x}, t)$

задачі (4.1) – (4.4) для півкруга радіуса $R = \sqrt{2}$ при $t = \frac{1}{3} j$, $j = \overline{0,3}$

Як бачимо з рис. 4.9, акумуляція тепла відбувається біля центроїда області (4.6), що підкріплюється значеннями аргументу максимізації наближень в табл. 4.4.

4.3 Обчислювальний експеримент для прямокутної області

Розглянемо задачу (4.1) – (4.4) в прямокутній області (4.7). Враховуючи довжини її сторін $a = \pi$, $b = 1$ та обрані параметри, функція Гріна для прямокутника зі сторонами a і b

$$G(x_1, x_2, s_2, s_2) = \frac{4}{ab} \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{\sin\left(\frac{\pi n}{a} x_1\right) \sin\left(\frac{\pi m}{b} x_2\right) \sin\left(\frac{\pi n}{a} s_1\right) \sin\left(\frac{\pi m}{b} s_2\right)}{\left(\frac{\pi n}{a}\right)^2 + \left(\frac{\pi m}{b}\right)^2 + \frac{1}{A\tau}}$$

набуде вигляду

$$G(x_1, x_2, s_2, s_2) = \frac{4}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{\sin nx_1 \sin \pi mx_2 \sin ns_1 \sin \pi ms_2}{n^2 + \pi^2 m^2 + 3}.$$

В табл. 4.5 наведено інформацію щодо збіжності методу двобічних наближень на кожному часовому шарі $t = \tau \cdot j$, $j = 1, 2, 3$, а саме: кількість виконаних ітерацій, значення правого кінця конусного відрізка $\langle 0, \beta_j \rangle$ та

величину $M \cdot \frac{B}{A} e^{\beta_j}$, що використовуються для перевірки умов (2.40) і (2.41).

Також вказано оцінку похибки побудованого наближення на кожному часовому шарі та наведено показник збіжності ітераційного процесу.

Таблиця 4.5 – Дані про кількість ітерацій, значення β_j , величину $M \frac{B}{A} e^{\beta_j}$,

оцінку похибки та показник збіжності для прямокутника
зі сторонами $a = \pi$, $b = 1$

j	Кількість ітерацій	β_j	$M \frac{B}{A} e^{\beta_j}$	Оцінка похибки	$\frac{\varepsilon^{(k+1)}}{\varepsilon^{(k)}}$
1	4	0,139277	0,139277	$0,11 \cdot 10^{-4}$	0,112
2	4	0,174706	0,144300	$0,15 \cdot 10^{-4}$	0,114
3	4	0,183669	0,145599	$0,16 \cdot 10^{-4}$	0,115

Як бачимо з табл. 4.5, умови збіжності ітераційного процесу методу двобічних наближень (2.40) і (2.41) виконано, а збіжність досягнута за 4 ітерації на кожному часовому шарі. Значення показника збіжності вказує на геометричну збіжність побудованих послідовностей наближень з показником $\approx 0,114$. Двобічний характер збіжності проілюстровано на рис. 4.10, де наведено ітераційний процес на першому часовому шарі $t = \tau = \frac{1}{3}$ (червоним пунктиром зображено верхні наближення $\{w^{(k)}(\mathbf{x})\}$, чорною лінією з напівпрозорим жовтим – наближення $U_1(\mathbf{x})$, зеленим пунктиром – верхні наближення $\{v^{(k)}(\mathbf{x})\}$).

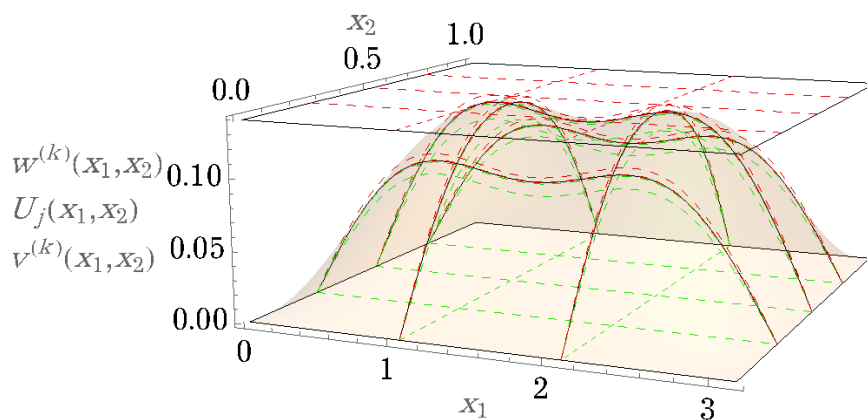


Рисунок 4.10 – Графіки $\{w^{(k)}(\mathbf{x})\}$, $U_1(\mathbf{x})$ та $\{v^{(k)}(\mathbf{x})\}$ на часовому шарі $t = \frac{1}{3}$
для прямокутника зі сторонами $a = \pi$, $b = 1$

На рис. 4.11 наведено графіки наближень $U_j(\mathbf{x})$, $j = \overline{0,3}$. За ними можна зробити висновок про зростання наближення зі збільшенням номеру часового шару.

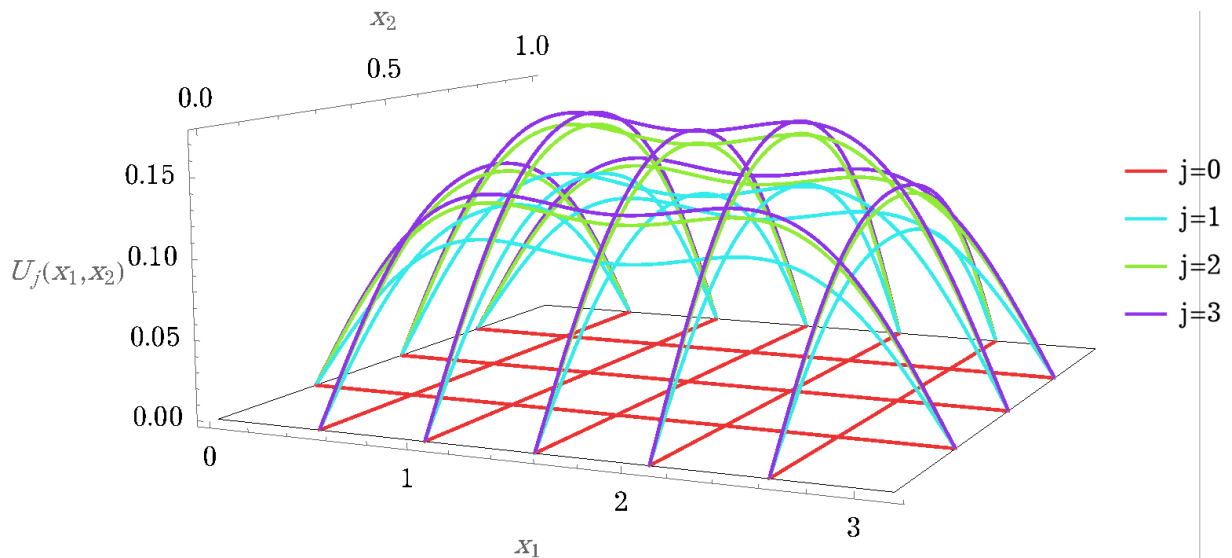


Рисунок 4.11 – Графіки наближених розв’язків $U_j(\mathbf{x})$ до розв’язку задачі (4.1) – (4.4) для прямокутника зі сторонами $a = \pi$, $b = 1$

на часових шарах $t = \frac{1}{3}j$, $j = 0, 1, 2, 3$

Це також підтверджується даними, що наведені в табл. 4.6: максимальне значення кожного наближення, аргумент максимізації, різниця між максимумами наближень на поточному та попередньому часовому шарі, значення інтегралу наближення по області (4.6), поділене на міру області, $\bar{u}_j = \frac{1}{\mu(\Omega)} \int_{\Omega} U_j(\mathbf{x}) ds$, та різниця між цими значеннями на поточному та попередньому часових шарах $\bar{u}_j - \bar{u}_{j-1}$. Як бачимо з табл. 4.6, різниця на поточному та попередньому шарі таких значень як максимум та інтеграл наближення, розділений на міру області, зменшується зі збільшенням номеру шару, тому у контексті фізичного сенсу задачі (4.1) – (4.4), можемо зробити висновок, що при обраних параметрах з часом зменшується кількість накопиченого тепла за однакові часові проміжки.

Таблиця 4.6 – Дані про максимум $U_j(\mathbf{x})$, $j = \overline{0,3}$, аргумент максимізації та різницю максимумів $U_j(\mathbf{x})$ і $U_{j-1}(\mathbf{x})$, значення \bar{u}_j та $\bar{u}_j - \bar{u}_{j-1}$, $j = \overline{1,3}$, для прямокутника зі сторонами $a = \pi$, $b = 1$

j	$\max_{\mathbf{x} \in \Omega} U_j(\mathbf{x})$	$\arg \max_{\mathbf{x} \in \Omega} U_j(\mathbf{x})$	$\max_{\mathbf{x} \in \Omega} U_j(\mathbf{x}) - \max_{\mathbf{x} \in \Omega} U_{j-1}(\mathbf{x})$	\bar{u}_j	$\bar{u}_j - \bar{u}_{j-1}$
0	0	Ω	–	0	–
1	0,134162	(0,959785;0,5)	0,134162	0,070952	0,070952
2	0,167210	(0,997858;0,5)	0,033048	0,087390	0,016437
3	0,175217	(1,012180;0,5)	0,008007	0,091287	0,003897

Теплокарти для розв'язку задачі (4.1) – (4.4) $u(\mathbf{x},t)$ в області (4.6), отриманого інтерполяцією вбудованими методами математичного пакету Mathematica 13 на основі побудованого каркасу наближень $U_j(\mathbf{x})$, $j = \overline{0,3}$, по часовій змінній у вузлах введеної сітки, зображено на рис. 4.12.

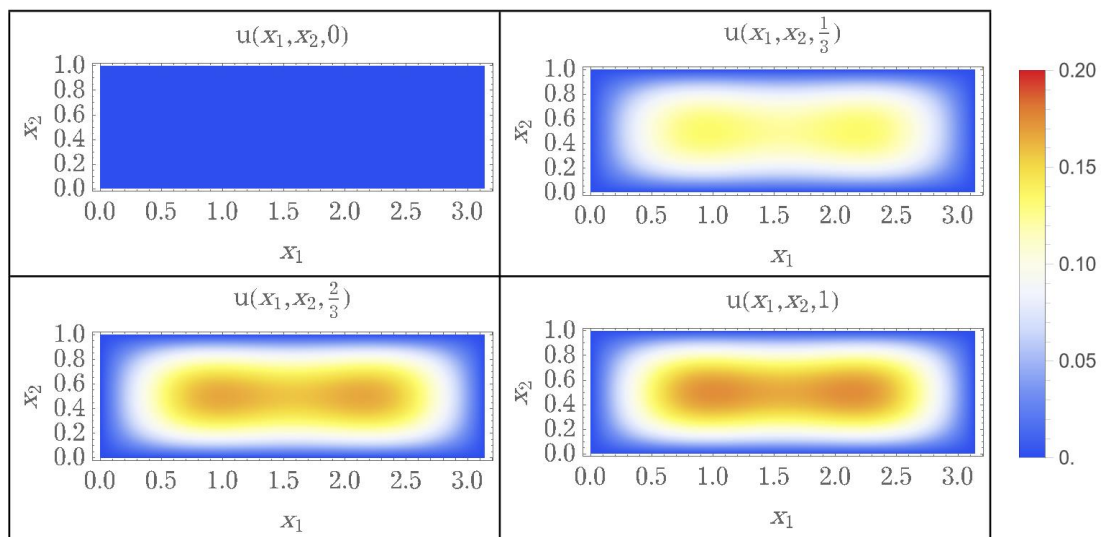


Рисунок 4.12 – Графіки теплокарт для наближеного розв'язку $u(\mathbf{x},t)$ задачі (4.1) – (4.4) для прямокутника зі сторонами $a = \pi$, $b = 1$

$$\text{при } t = \frac{1}{3} j, \quad j = \overline{0,3}$$

Як бачимо з рис. 4.12, можна умовно виділити два регіони акумуляції тепла:

$$\{(x_1, x_2) : 0,7 \leq x_1 \leq 1,3; 0,3 \leq x_2 \leq 0,7\}$$

та

$$\{(x_1, x_2) : 1,7 \leq x_1 \leq 2,3; 0,3 \leq x_2 \leq 0,7\}.$$

Інформація про значення аргументу максимізації наближень, наведена в табл. 4.4, показує, що “найтепліша” точка належить до першого регіону та лежить на прямій, що проходить через центроїду області (4.6) паралельно вісі Ox_1 .

Висновки за розділом 4

Для задачі (4.1) – (4.4) було проведено обчислювальний експеримент в трьох областях однакової міри (4.5) – (4.7). Аналізуючи та порівнюючи дані з табл. 4.2, табл. 4.4 і табл. 4.6 можна зробити висновок, що у насипі, перерізом якого є прямокутна область з довжинами сторін $a = \pi$ та $b = 1$ накопичується менше тепла як в одній точці перерізу так і взагалі, оскільки середнє значення та максимум наближення до шуканої функції зміни температури для цього випадку є найменшими на останньому часовому шарі моделювання. Насипи з перерізами у вигляді напівкруга з радіусом $\sqrt{2}$ та круга з радіусом 1 займають друге та третє місце за цими параметрами. Ці результати корелюються з ранжуванням областей за зростанням довжини межі відповідно, що пояснюється збільшенням ділянки, на якій підтримується стала температура, при збереженні тої ж кількості матеріалу.

Для встановлення можливості досягнення температури, достатньої для самозаймання насипу, на практиці необхідно перейти від функції зміни температури до функції розподілу температури.

ВИСНОВКИ

У кваліфікаційній роботі було досліджено використання методу Рунге та методу двобічних наближень для розв'язання задачі, що виникає при моделюванні процесів самозаймання. Отримані знання були застосовані на практиці, результатом чого є наближений розв'язок тестової задачі.

1. Проведено огляд математичних моделей процесів самозаймання та чисельних методів, що застосовні для їх дослідження, зокрема, методу Рунге у поєднанні з методом двобічних наближень.

2. Розглянуто двовимірну початково-крайову задачу для напівлінійного рівняння теплопровідності. Згідно з методом Рунге після дискретизації було отримано послідовність крайових задач, кожна з яких була зведена до рівняння Гаммерштейна, для якого побудували ітераційний процес двобічного методу з використанням функції Гріна та дослідили умови його збіжності.

3. Було побудовано алгоритм застосування методу Рунге та методу двобічних наближень для розглянутої задачі. Розроблений алгоритм реалізували в системі символічної математики Mathematica 13.3 та провели обчислювальний експеримент для трьох областей.

4. Подальше дослідження може бути пов'язане або з розглядом альтернативних математичних моделей процесів самозаймання, зокрема тих, що використовують системи диференціальних рівнянь, або тривимірних початково-крайових задач.

ПЕРЕЛІК ДЖЕРЕЛ ПОСИЛАННЯ

1. Калініченко А. С. Застосування методів Роте та двобічних наближень до аналізу процесів самозаймання у крузі. *27-й Міжнародний молодіжний форум «Радіоелектроніка та молодь у XXI столітті»* : зб. матеріалів форуму (м. Харків, 10-12 травня 2023 р.). Т. 7. Харків : ХНУРЕ, 2023. С. 145–146.
2. Kalinichenko A., Sidorov M. Modeling of processes of spontaneous ignition using Rothe's and two-sided approximation methods. *II International Youth Scientific & Practical Conference «LEARNING & TEACHING: after War and during Peace»*. Kharkiv, 2023. P. 201.
3. Carras J. N., Young B. C. Self-heating of coal and related materials: Models, application and test methods. *Progress in Energy and Combustion Science*. 1994. Vol. 20, no. 1. P. 1–15.
4. Yuan L., Smith A. CFD modeling of spontaneous heating in a large-scale coal chamber. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*. 2009. Vol. 22, no. 4. P. 426–433.
5. Semenov N. Zur Theorie des Verbrennungsprozesses. *Zeitschrift für Physik*. 1928. Bd. 48, Nr. 7-8. S. 571–582.
6. Франк-Каменецкий Д. А. Распределение температур в реакционном сосуде и стационарная теория теплового взрыва // Докл. АН СССР. 1938. Т. 18, № 7. С. 411–412.
7. Bowes P. C. Self-heating: Evaluating and controlling the hazards. London : Department of the Environment, Building Research Establishment, 1984. 500 p.
8. Matthew B. Modelling the Self-Heating of Steel Stockpiles. Wollongong : University of Wollongong, 2023. 210 p.
9. Sexton M. J., Macaskill C., Gray B. F. Thermal ignition in rectangular and triangular regions. *ANZIAM Journal*. 2000. Vol. 42. P. 1283.
10. Cutillo E. A., Bizon K., Continillo G. Assessing the Effect of Variable Ambient Temperature on The Self-Ignition of a Reaction-Diffusion System Employing a Reduced Order Modelling Methodology. *Chemical Engineering Transactions*. 2023. Vol. 99. P. 523–528

11. Carres J. N., Saghafi A. Predicting spontaneous combustion in spoil piles from open cut coal mines. *The 1st Australasian Coal Operators Conference COAL98 : proceedings of conference* (Wollongong, 18-20 february 1998). Wollongong : University of Wollongong, 1998. P. 617–625

12. Самарский А. А. Теория разностных схем. 3-е изд., испр. Москва : Наука, 1989. 616 с.

13. Crank J., Nicolson P. A practical method for numerical evaluation of solutions of partial differential equations of the heat-conduction type. *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*. 1947. Vol. 43, no. 1. P. 50–67.

14. Rothe E. Zweidimensionale parabolische Randwertaufgaben als Grenzfall eindimensionaler Randwertaufgaben. *Mathematische Annalen*. 1930. Bd. 102, Nr. 1. S. 650–670.

15. Франк-Каменецкий Д. А. Основы макрокинетики. Диффузия и теплопередача в химической кинетике. Долгопрудный : Издательский Дом «Интеллект», 2008. 408 с.

16. Красносельский М. А. Положительные решения операторных уравнений. Москва : Физматгиз, 1962. 394 с.

17. Опойцев В. И., Хуродзе Т. А. Нелинейные операторы в пространствах с конусом. Тбилиси : Изд-во Тбилис. ун-та, 1984. 246 с.

18. Сидоров М. В. Метод Роте у комбінації з методом двобічних наближень розв'язання початково-крайових задач для напівлінійного рівняння теплопровідності. *Вісник Запорізького національного університету. Фізико-математичні науки*. 2018. № 1. С. 108–127.

19. Литвин О. М. Інтерлінація та інтерфлетація функцій і структурний метод В.Л. Рвачова. *Математичні методи та фізико-механічні поля*. 2007. Т. 50, № 4. С. 61–82.

20. Wolfram Language Quick Revision History. URL : <https://www.wolfram.com/language/quick-revision-history/> (дата звернення: 07.01.2024)