ДОСЛІДЖЕННЯ ТЕРМОХІМІЧНИХ ПРОЦЕСІВ МЕТОДОМ ДВОБІЧНИХ НАБЛИЖЕНЬ НА ОСНОВІ ВИКОРИСТАННЯ ФУНКЦІЇ ГРІНА

Вовченко П.А.
Науковий керівник – д-р фіз.-мат. наук, доц. Сидоров М.В.
Харківський національний університет радіоелектроніки
61166, Харків, просп. Науки, 14, каф. прикладної математики,
тел. (057) 702-14-36, e-mail: platon.vovchenko@nure.ua

At mathematical modeling of stationary processes in chemical kinetics, theories of combustion and explosion come to necessity of numerical analysis of boundary problems for nonlinear differential equations of elliptic type. These boundary problems usually have the form $-\Delta u = f(\mathbf{x},u)$, $\mathbf{x}\in\Omega$, $u\big|_{\partial\Omega}=0$, where Δ – Laplace operator, Ω – the area where the process under consideration takes place.

В процесі неізотермічної хімічної реакції за участю декількох хімічних речовин нормалізовані хімічні концентрації і температура описуються системою рівнянь «реакція-дифузія». У випадку однієї речовини, якщо коефіцієнт дифузії і температуропровідність є сталими, стаціонарні рівняння для концентрації u і температури v запишуться у формі [1]

$$-D_1\Delta u = -a_1 f(u,v) \text{ у } \Omega,$$
$$-D_2\Delta v = a_2 f(u,v) \text{ у } \Omega,$$

і можуть бути зведені до двох незалежних рівнянь.

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

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

Відповідно до кінетиці Арреніуса функція $r(v)$ визначається рівністю

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

де E – енергія активації; R – універсальна газова стала; $\gamma=\dfrac{E}{R}$ – число Арреніуса; $r_0=e^{\gamma}$.

Тоді для моделювання одновимірних термохімічних процесів розглядатимемо дві крайові задачі: задачу Луівілля-Гельфанда-Брату

$$-u''=\lambda e^{u},\ 0<x<1, \tag{1}$$
$$u(0)=u(1)=0, \tag{2}$$

і задачу

$$-u''=\lambda e^{\frac{u}{1+\alpha u}},\ 0<x<1, \tag{3}$$
$$u(0)=u(1)=0, \tag{4}$$

яка є тестовою при моделюванні процесів «реакція-дифузія».

За допомогою функції Гріна кожна з крайових задач (1), (2) і (3), (4) була зведена до операторного рівняння $u = T(u)$, для аналізу якого застосовано методи теорії нелінійних операторів у напівупорядкованих просторах [2]. Якщо ізотонний оператор T, що діє у банаховому просторі U, напівупорядкованному нормальним конусом K, є цілком неперервним, u_0-увігнутим та має інваріантний конусний відрізок $< v_0, w_0 >$, то ітераційний процес

$$v^{(k+1)} = T(v^{(k)}),\ w^{(k+1)} = T(w^{(k)}),\ k = 0, 1, 2, \ldots, \tag{5}$$

починаючи з точки (v_0, w_0), двобічно збігається до єдиної на $< v_0, w_0 >$ нерухомої точки u^* оператора T:

$$v_0 \le v^{(1)} \le \ldots \le v^{(n)} \le \ldots \le u^* \le \ldots \le w^{(n)} \le \ldots \le w^{(1)} \le w_0 . \tag{6}$$

Двобічна збіжність послідовності наближень (5) розуміється в сенсі виконання ланцюга нерівностей (6).

Наближеним розв'язком на k-й ітерації є функція

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

а похибка на k-й ітерації оцінюється нерівністю

$$\left\| u^* - u^{(k)} \right\| \le \frac{1}{2} \max_{x \in [0,1]} (w^{(k)}(x) - v^{(k)}(x)) .$$

Для задачі (1), (2) ітераційний процес (5) зійшовся за п'ять ітерацій при значенні параметра $\lambda = 1{,}5$. Для задачі (3), (4) ітераційний процес зійшовся за чотири ітерації при значеннях параметрів $\lambda = 1{,}5$ та $\alpha = 0{,}5$.

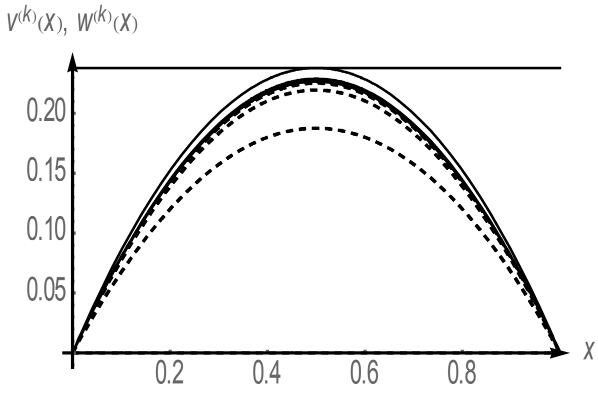

Рисунок 1 – Розв'язок задачі (1), (2)

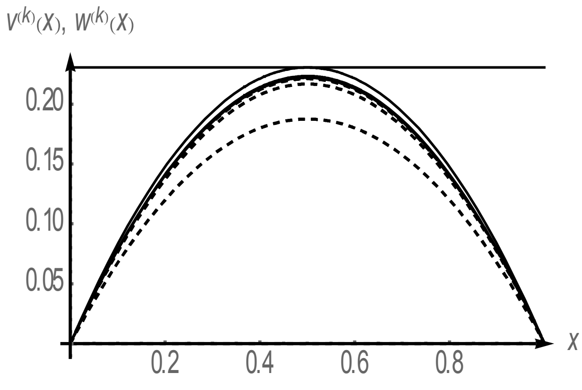

Рисунок 2 – Розв'язок задачі (3), (4)

Список використаних джерел:

1. Ananthaswamy V., Rajendran L. Analytical Solutions of Some Two-Point Non-Linear Elliptic Boundary Value Problems // Applied Mathematics. 2012. Vol. 3, No 9. Pp. 1044-1058.

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