УДК 517.957

Л. М. Мамай (Ужгородський нац. ун-т)

ПРО МАТЕМАТИЧНІ МОДЕЛІ ДЕЯКИХ НЕЛІНІЙНИХ ПРОЦЕСІВ ТА ЇХ РОЗВ'ЯЗУВАННЯ

In this paper was cited some nonlinear functional equations which are mathematical models of real physical processes.

В роботі наведені та розв'язані деякі нелінійні функціональні рівняння, які є математичними моделями реальних фізичних процесів.

Одним з основних методів дослідження багатьох складних явищ і процесів у фізиці, хімії, біології, економіці та екології є математичне моделювання. Ефективним математичним описом багатьох задач часто служать нелінійні функціональні рівняння: системи нелінійних скалярних рівнянь, диференціальні, інтегральні та інтегро-диференціальні рівняння.

Важливим моментом при виборі тих або інших видів рівнянь чи інших математичних залежностей є пошук вдалої метематичної моделі, яка би відображала реальне явище і разом з тим яку можна було б дослідити та отримати чисельний результат. Наприклад, звичайні диференціальні рівняння чи рівняння з частинними похідними стали традиційними математичними моделями для багатьох фізичних та ряду інших явищ, а інтегральні рівняння в якості математичних моделей реальних процесів почали застосовуватися пізніше диференціальних, причому загальних рекомендацій для їх застосування існує значно менше. В більшості випадків, для побудови таких моделей служать відповідні загальні фізичні закони. Зокрема, застосування відомих законів збереження маси, імпульсу і енергії приводять до моделей конкретних явищ і процесів у вигляді інтегральних рівнянь. Використання вказаних моделей має ряд переваг: вони не містять похідних від функцій і тим самим не накладають обмежень на їх гладкість, крім цього такі моделі допускають існування розривних розв'язків. Важливе значення інтегральних рівнянь в розв'язуванні задач дослідження різного роду полів і середовищ, задач електродинаміки та моделювання динамічних об'єктів і систем.

Наведемо декілька прикладів, які ілюструють застосування нелінійних функціональних рівнянь для моделювання фізичних процесів. Розглянемо модельний приклад детонації твердої вибухової речовини [1].

Рівняння енергії, якому задовольняє розподіл температури при детонації твердої вибухової речовини може бути записане у вигляді рівняння

$$\frac{d^2\theta}{dt^2} + \frac{2}{t}\frac{d\theta}{dt} + \alpha \cdot e^{\frac{\theta}{1+\frac{\theta}{\gamma}}} = 0. \tag{1}$$

Воно доповнюється крайовими умовами для $t = 0$ і $t = 1$

$$\frac{d\theta(0)}{dt} = 0, \quad N_{nu}\theta(1) + \frac{d\theta(1)}{dt} = 0, \tag{2}$$

де N_{nu} – число Нуссельта.

Для розв'язання (1), (2) застосуємо метод інтегральних рівнянь [1], який полягає в заміні крайової задачі еквівалентним їй інтегральним рівнянням. Для побудови такого рівняння використовують функцію Гріна, яка породжується лінійною частиною рівняння (1) та крайовими умовами (2). Дана функція має вигляд

$$G(t,\xi)=\begin{cases}\dfrac{1}{\xi}-1+\dfrac{1}{N_{nu}}, & t<\xi,\\[2ex] \dfrac{1}{t}-1+\dfrac{1}{N_{nu}}, & t>\xi,\end{cases}$$

а розв'язування крайової задачі (1), (2) зводиться до розв'язування нелінійного інтегрального рівняння

$$\theta(t)=\int\limits_0^1 G(t,\xi)\alpha\xi^2 e^{\frac{\gamma\theta}{\gamma+\theta}}d\xi. \qquad (3)$$

Розглянемо випадок, коли $N_{nu}=1$; $\alpha=1$; $\gamma=0,1$. Тоді задача (1), (2) та функція Гріна $G(t,\xi)$ відповідно будуть мати вигляд

$$\begin{cases}\dfrac{d^2\theta}{dt^2}+\dfrac{2}{t}\dfrac{d\theta}{dt}+\alpha\cdot e^{\frac{\theta}{1+10\cdot\theta}}=0,\\[2ex] \dfrac{d\theta(0)}{dt}=0, \quad \theta(1)+\dfrac{d\theta(1)}{dt}=0,\end{cases} \qquad (4)$$

$$G(t,\xi)=\begin{cases}\dfrac{1}{\xi}, & t<\xi,\\[2ex] \dfrac{1}{t}, & t>\xi.\end{cases} \qquad (5)$$

Замінюючи інтеграл у правій частині рівняння (3) при вказаних значеннях параметрів N_{nu}, α, γ його наближеним значенням за формулою Сімпсона з числом вузлів $n=4$, будемо мати для значень розв'язків $\theta(t_i)=\theta_i$ у вузлах $t_i=0,25i,\ i=\overline{1,4}$ наступну систему нелінійних скалярних рівнянь

$$\begin{cases}\theta_1=\frac{1}{12}\left(e^{\frac{\theta_1}{1+10\theta_1}}+e^{\frac{\theta_2}{1+10\theta_2}}+3e^{\frac{\theta_3}{1+10\theta_3}}+e^{\frac{\theta_4}{1+10\theta_4}}\right),\\[2ex] \theta_2=\frac{1}{12}\left(\frac{1}{2}e^{\frac{\theta_1}{1+10\theta_1}}+e^{\frac{\theta_2}{1+10\theta_2}}+3e^{\frac{\theta_3}{1+10\theta_3}}+e^{\frac{\theta_4}{1+10\theta_4}}\right),\\[2ex] \theta_3=\frac{1}{12}\left(\frac{1}{3}e^{\frac{\theta_1}{1+10\theta_1}}+\frac{2}{3}e^{\frac{\theta_2}{1+10\theta_2}}+3e^{\frac{\theta_3}{1+10\theta_3}}+e^{\frac{\theta_4}{1+10\theta_4}}\right),\\[2ex] \theta_4=\frac{1}{12}\left(\frac{1}{4}e^{\frac{\theta_1}{1+10\theta_1}}+\frac{1}{2}e^{\frac{\theta_2}{1+10\theta_2}}+\frac{9}{4}e^{\frac{\theta_3}{1+10\theta_3}}+e^{\frac{\theta_4}{1+10\theta_4}}\right).\end{cases} \qquad (6)$$

Для розв'язування системи (6) використано εs-алгоритм [2] та, з точністю $\eta=0,0001$ за нев'язкою, отримано один розв'язок: $\theta_1=0,54270$, $\theta_2=0,49737$, $\theta_3=0,45206$, $\theta_4=0,36158$.

Системи нелінійних скалярних рівнянь безпосередньо можуть служити математичними моделями реальних природничих процесів. Серед них існує клас задач з параметрами, де є функціональна залежність фізичних величин від набору параметрів. В залежності від значень параметрів вони будуть визначати певний конкретний стан фізичного процесу. Результатом обчислення математичної моделі будуть множини розв'язків, які відповідатимуть множинам значень параметрів. Розглянемо систему нелінійних скалярних рівнянь [3], в якій фігурують три множини параметрів. Наступна система визначає швидкості різних стадій хімічної реакції:

$$\begin{cases} r_1 = 1 - x_1 - k_1 x_1 x_6 + kr_1 x_4, \\ r_2 = 1 - x_2 - k_2 x_2 x_6 + kr_2 x_5, \\ r_3 = -x_3 + 2k_3 x_4 x_5, \\ r_4 = k_1 x_1 x_6 - kr_1 x_4 - k_3 x_4 x_5, \\ r_5 = 1,5(k_2 x_2 x_6 - kr_2 x_5) - k_3 x_4 x_5, \\ r_6 = 1 - x_4 - x_5 - x_6, \end{cases} \tag{7}$$

де k_1, kr_1, k_2, kr_2, k_3 — визначені коефіцієнти швидкості реакції (параметри), $x_1, \ldots, x_6$ — число молів компонентів, які приймають участь у хімічній реакції, а $r_1, \ldots, r_6$ — швидкості реакції.

У стаціонарному стані швидкості стадій хімічного процесу досягають рівноважного стану, тобто зміна їх r_i рівна нулю $(i = \overline{1,6})$. Використовуючи εs-алгоритм [2] було знайдено всі ізольовані розв'язки системи (7) при $r_i = 0$, $i = \overline{1,6}$ для трьох різних множин коефіцієнтів швидкості реакції (таблиця 1).

Таблиця 1

Множини параметрів

Параметр	Множина 1	Множина 2	Множина 3
k_1	31,24	17,721	17,721
kr_1	2,062	3,483	6,966
k_2	0,272	0,118	0,118
kr_2	0,02	0,033	333,333
k_3	303,03	505,051	505,051

Отримані розв'язки для кожної множини параметрів наведені у таблиці 2.

Таблиця 2

Наближені розв'язки системи нелінійних скалярних рівнянь (7)

	Множина 1		Множина 2		Множина 3	
i	1	2	1	2	1	2
x_1	0,973898	1,030740	0,971359	1,051102	0,978726	-0,170347
x_2	0,982821	1,020285	0,980375	1,033431	0,986220	0,219778
x_3	0,052169	-0,060063	0,057867	-0,100286	0,042464	2,340585
x_4	0,935638	-0,000099	0,830269	-0,000099	0,712534	-1,062925
x_5	0,000092	1,001060	0,0000069	1,002861	0,000059	-0,002180
x_6	0,06427	-0,000961	0,169662	-0,002762	0,287407	2,065105
η	0,000316	0,000814	0,000582	0,000960	0,000564	0,000068

Хоч при кожній, з наведених в таблиці 2, множині параметрів система (7) має два розв'язки, проте фізичний зміст має тільки перший, оскільки допустимими є розв'язки, у яких $x_i \geq 0$, $i = \overline{1,6}$.

До розв'язування систем нелінійних склярних рівнянь також приводить задача теоретичного визначення рівноважного складу суміші реагуючих газів, яка часто зутрічається у різних областях техніки. Одна з таких задач описана в [1]. Нехай нагрівається один моль CO_2 при сталому тиску 10 атм. Потрібно знайти рівноважні складові в інтервалі температур від 1000 до 6000 K в припущенні, що рівноважний склад містить CO_2, CO та O_2. Виходячи з умови запишемо рівняння

$$CO_2 \to \alpha CO_2 + \beta CO + \gamma O_2,$$

де в лівій частині вказано початковий стан, а в правій — хімічний склад при рівновазі. Шукані параметри α, β, γ — числа молів компонентів. З останнього рівняння, враховуючи баланс елементів C і O, отримаємо співвідношення

$$\begin{aligned} \alpha + \beta &= 1, \\ 2\alpha + \beta + 2\gamma &= 2. \end{aligned} \tag{8}$$

Опишемо спосіб, який дозволяє отримати ще одне рівняння для визначення трьох невідомих величин α, β, γ, використовуючи закон діючих мас.

В загальному вигляді рівняння хімічної реакції записується за допомогою стехіометричної формули [4]:

$$v_1 A_1 + v_2 A_2 + \cdots \leftrightarrow v_1' A_1' + v_2' A_2' + \cdots ,$$

де v_i, v_i', $i = 1, 2, \ldots$ — стехіометричні коефіцієнти відповідно вихідних і кінцевих речовин, A_i, A_i', $i = 1, 2, \ldots$ — вихідні і кінцеві речовини. Запишемо закон діючих мас

$$\prod_i p_i^{v_i} = K_p,$$

де K_p — константа хімічної рівноваги, виражена через парціальні тиски реагентів в ідеальній газовій суміші і є функцією тільки температури $K_p(T)$. Використаємо формулу для константи рівноваги

$$K_p = \frac{n_{A_1}^{v_1} \cdot n_{A_2}^{v_2} \cdots}{n_{A_1'}^{v_1'} \cdot n_{A_2'}^{v_2'} \cdots} \left(\frac{p}{\sum\limits_i n_i} \right)^{\Delta n}, \tag{9}$$

де n_{A_i} та $n_{A_i'}$, $i = 1, 2, \ldots$ — число молів відповідно вихідних і кінцевих речовин, v_i, v_i', $i = 1, 2, \ldots$ — стехіометричні коефіцієнти відповідно вихідних і кінцевих речовин, p — тиск, n_i, $i = 1, 2, \ldots$ — число молів реагента у стані рівноваги, $\Delta n = v_1 + v_2 + + \cdots - v_1' + v_2' - \cdots$ — зміна числа молів реагентів за стехіометричним рівнянням.

Розглянемо рівняння хімічної реакції

$$CO_2 \rightleftarrows CO + \frac{1}{2} O_2 \tag{10}$$

і використаємо для нього формулу (9). В нашому випадку $n_{A'_1}^{v'_1} = \beta$, $n_{A'_2}^{v'_2} = \gamma^{\frac{1}{2}}$, $n_{A_1}^{v_1} = \alpha$, $\sum\limits_{i=1}^{3} n_i = \alpha + \beta + \gamma$, а $\Delta n = 1 + \frac{1}{2} - 1 = \frac{1}{2}$. Тоді, згідно (9), для реакції (10) справедлива формула

$$\frac{\beta\sqrt{\gamma}}{\alpha}\frac{\sqrt{p}}{\sqrt{\alpha+\beta+\gamma}} = K_p,$$

або

$$\beta^2\gamma p - K_p^2\alpha^2(\alpha+\beta+\gamma) = 0. \tag{11}$$

Для визначення α, β, γ при заданій температурі, враховуючи рівняння (8) та (11), одежимо систему нелінійних скалярних рівнянь:

$$\begin{cases} \alpha + \beta - 1 = 0, \\ 2\alpha + \beta + 2\gamma - 2 = 0, \\ \beta^2\gamma p - K_p^2\alpha^2(\alpha+\beta+\gamma) = 0. \end{cases}$$

В роботі [5] наведено розвязки даної СНСР, отримані використовуючи εs-алгоритм, при різних значеннях K_p.

Описані приклади ілюструють можливість ефективного застосування нелінійних функціональних рівнянь при вивченні багатьох складних природничих явищ та процесів.

1. *На Ц.* Вычислительные методы решения прикладных граничных задач. – М.: Мир, 1982. – 294 с.
2. *Бабич М. Д., Шевчук Л. Б.* Об одном алгоритме приближенного решения систем нелинейных интегральных уравнений // Кибернетика. – 1982. – №2. – С. 74–79.
3. *Shacham M.* Numerical solution of constrained non-linear algebraic equations / Mordechai Shacham //Internatinal journal for numerical methods in engineering. – 1986. – vol. 23. – C. 1455–1481.
4. *Гомонай В.І., Гомонай О.В.* Фізична хімія: Підручник. – Ужгород: ВАТ "Патент 2004. - 217 с.
5. *Бабич М.Д., Гецко О.М.* Математичне моделювання і обчислювальний експеримент //Науковий вісник Ужгородського університету. – Сер. Математика і інформатика. – 2005. – вип. 10-11. – С. 4–8.

Одержано 08.09.2012