ISSN № 9125 0912. ВІСНИК ДНУ. Серія "Моделювання". № 8. 2010. Вип. 2. С. 36–44

Проблеми математичного моделювання
та теорії диференціальних рівнянь

УДК 536.24

АСИМПТОТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ СИСТЕМЫ УРАВНЕНИЙ ОНЗАГЕРА

А. В. Дидинский, Д. В. Евдокимов, А. А. Кочубей,
Н. В. Поляков

*Днепропетровский национальный университет им. Олеся Гончара,
Днепропетровск 49050, пр. Гагарина 72. E-mail: devd@mail.ru*

Система уравнений Онзагера описывает сложные системы в жидкостях и газах, в которых имеют место процессы теплопроводности и диффузии. В последнее время она все больше привлекает внимание исследователей в связи с развитием многих современных технологий. Обычные численные методы не могут быть применены к системе уравнений Онзагера непосредственно из-за трудностей, связанных с корректностью расчета недиагональных элементов, которые на несколько порядков меньше, чем диагональные. Для преодоления этой трудности в настоящей работе предложен соответствующий асимптотический алгоритм.

Ключевые слова. Система уравнений Онзагера, асимптотический метод, метод конечных разностей, термодиффузия, связанная диффузия.

1. Введение

Система уравнений Онзагера — основная математическая модель сложных диффузионных процессов — как непосредственно, так и в виде разного рода обобщений вызывает в последнее время все больший интерес не только у исследователей соответствующих физико-химических систем, но и у разработчиков новых производственных технологий. Специфические особенности системы уравнений Онзагера, о которых будет подробно сказано ниже, позволяют отнести краевые задачи, сформулированные для этой системы, к так называемым многомасштабным проблемам со всеми связанными с указанным типом проблем вычислительными трудностями. Последнее обстоятельство вынуждает разрабатывать для системы уравнений Онзагера специальные методы решения. Использование асимптотических разложений по малому параметру, естественным образом возникающему в краевых задачах для системы уравнений Онзагера, представляется более универсальным и мощным подходом, нежели специальные аналитические преобразования, применявшиеся до настоящего времени. Применяемые совместно с известными численными методами указанные асимптотические разложения дают возможность развития универсальных численных подходов к решению краевых задач для системы уравнений Онзагера.

2. Актуальность тематики исследования, ее связь с основными научно-техническими задачами

Как и для любой математической модели, актуальность исследования системы уравнений Онзагера определяется двумя факторами: во-первых, значением процессов, описываемых этой математической моделью, для современных науки, техники и особенно производственных технологий, и, во-вторых, необходимостью развития данной математической модели для улучшения понимания и более эффективного использования рассматриваемого процесса. Как отмечалось выше, математические модели на основе системы уравнений Онзагера применяются для описания диффузионного тепломассообмена в многокомпонентных системах и отличаются от традиционных математических моделей тепломассообмена учетом термодиффузии, бародиффузии, связанной диффузии и подобных явлений. Таким образом, речь идет о множестве процессов, в которых названные эффекты являются в некотором смысле доминирующими, а также процессах в многокомпонентных системах, повышенные требования к расчету которых заставляют учитывать перечисленные выше эффекты. Среди подобных процессов хотелось бы отметить тепломассообмен в многокомпонентных системах в условиях микрогравитации [1, 2], тепломассообмен в пористых средах [3, 4], процессы получения чистых материалов и сплавов с заданными свойствами [5]. Важность перечисленных групп явлений как для развития фундаментальных и технических наук, так и для разработки новых производственных технологий не вызывает ни малейших сомнений. Поскольку в данном рассмотрении речь идет о малых эффектах, достаточно сложно определяемых экспериментально, основную роль в изучении указанных выше процессов играют теоретические методы и, в первую очередь, методы математического и численного моделирования, в данном случае основанные на системе уравнений Онзагера. Таким образом, становится очевидной ключевая роль, которую играет изучение системы уравнений Онзагера в исследовании процессов тепломассообмена в многокомпонентных жидких и газообразных системах в условиях микрогравитации, при получении сверхчистых материалов и сплавов с заданными свойствами, в пористых средах, а также в разработке производственных технологий на их основе. Указанные обстоятельства и определяют актуальность тематики исследований, которым посвящена настоящая статья.

3. Обзор работ по рассматриваемой тематике и анализ современного состояния вопроса

Система уравнений Онзагера впервые возникла в термодинамике необратимых процессов [6, 7] при описании тепломассообмена в сложных системах. Система уравнений Онзагера достаточно быстро стала основной математической моделью, используемой в теоретической физике для описания соответствующих процессов, однако в прикладных расчетах она почти не использовалась. На прикладное значение системы уравнений Онзагера для тепломассообмена в пористых средах впервые указал А. В. Лыков [3], он же указал и на актуальность данной системы для исследования процессов тепломассообмена в условиях микрогравитации [1]. По поводу значения термодиффузии и связанной диффузии для процессов получения специальных материалов и сплавов до сих пор продолжаются интенсивные дискуссии [8]. К сожалению, отсутствие систематических прикладных расчетов на основе системы уравнений Онзагера привело к тому, что для ее численного решения применяли прямые численные подходы, которые, как показано ниже, в данном случае неэффективны, и только в работах [4, 9] был поставлен вопрос о разработке специальных методов численного решения системы уравнений Онзагера. Однако в упомянутых работах [4, 9] была предложена аналитическая методика преобразования системы уравнений Онзагера, обладающая как всеми достоинствами, так и всеми недостатками таковых. Аналитический подход удобен и эффективен в случаях двух и трех уравнений, для четырех уравнений он несколько громоздок, а для большего числа уравнений он представляется излишне громоздким и, кроме того, перестает быть полностью аналитическим, поскольку собственные числа матрицы Онзагера приходится определять приближенно. Второй особенностью работ [4, 9] была ориентация преимущественно на методы граничных интегральных уравнений, которым тоже присущи определенные ограничения. Таким образом, можно заключить, что для достаточно простых частных случаев краевых задач для системы уравнений Онзагера был достигнут существенный прогресс, благодаря построению аналитических решений, однако в общем случае соответствующий численный подход разработан не был.

4. Цель работы

Целью данного исследования является разработка универсального приближенного подхода, основанного на применении асимптотических разложений и позволяющего эффективно численно решать краевые задачи для системы уравнений Онзагера.

5. Постановка задачи

Системой уравнений Онзагера в общем виде будем называть следующую систему параболических уравнений:

$$\frac{\partial u_i}{\partial \tau} = \sum_{j=1}^{N} \alpha'_{ij} \operatorname{div}\,(q_j)\,; i = \overline{1, N}; \tag{5.1}$$

где обобщенный поток

$$q_j = \lambda_j \operatorname{grad}\,(u_j)\,; \tag{5.2}$$

α'_{ij} — модифицированные коэффициенты Онзагера. Под функциями u_j в (5.1) подразумеваются соответствующие концентрации, температура и, возможно, давление. Тогда по физическому смыслу λ_j — это коэффициенты диффузии, теплопроводности и фильтрации. В классической модели Онзагера [6, 7] коэффициенты матрицы существенным образом зависят от искомых величин, прежде всего, температуры. Зависимость коэффициентов теплопроводности, диффузии и фильтрации от температуры и концентраций компонент смеси хорошо известна в теории тепломассообмена и представляет собой одну из основных форм нелинейностей, изучаемых в соответствующих ее разделах. Однако во всех математических моделях, рассмотренных А. В. Лыковым [1, 3], коэффициенты полагались постоянными, что соответствует процессам, протекающим в достаточно узком диапазоне изменения определяемых величин. Очевидно, что система (5.1) является обобщением ранее применявшихся математических моделей на основе системы уравнений Онзагера. Начальные условия для системы уравнений (5.1) ставятся традиционным образом:

$$u_i\left(\tau=0,X\right)=u_{i0}\left(X\right);i=\overline{1,N}; \tag{5.3}$$

где X — обобщенная точка пространства, u_{i0} — известные функции. Граничные условия для системы уравнений (5.1) оказываются более сложными, учитывая возможность фазовых переходов на границе и сложные нелинейные зависимости характеристик протекания процесса фазового перехода от параметров среды, определяемых искомыми функциями, особенно для фазовых переходов жидкость — газ. Общий вид граничных условий:

$$f_k\left(u_i,\frac{\partial u_i}{\partial n}\right)=0;k=\overline{1,N};i=\overline{1,N}; \tag{5.4}$$

однако столь сложный вид граничных условий, существенно затрудняющий решение, реализуется в весьма ограниченном числе случаев фазовых переходов. А, поскольку процессы фазовых переходов представляют отдельный интерес и заслуживают специального исследования, которое не входит в рамки настоящей работы, исключим общий случай граничных условий из рассмотрения и ограничимся традиционной для теории тепломассообмена постановкой граничных условий первого рода

$$u_i\left|_{\Gamma_{Ii}}=u_{ia};i=\overline{1,N};\right. \tag{5.5}$$

второго рода

$$\lambda_i\frac{\partial u_i}{\partial n}\left|_{\Gamma_{IIi}}=q_{ia};i=\overline{1,N};\right. \tag{5.6}$$

или третьего рода

$$\lambda_i\frac{\partial u_i}{\partial n}\left|_{\Gamma_{IIIi}}=\beta_{ia}\left(u_i\left|_{\Gamma_{Ii}}-u_{ia}\right.\right);i=\overline{1,N};\right. \tag{5.7}$$

где $\Gamma_{Ii},\Gamma_{IIi},\Gamma_{IIIi}$ обозначают совокупности частей границы области, на которых для i-й компоненты заданы соответствующие граничные условия, u_{ia}, q_{ia}— известные функции.

6. Алгоритм решения

По физическому смыслу элементов матрицы Онзагера имеет место следующее соотношение

$$\alpha_{ij}^{'}<<\alpha_{ii}^{'},\ i\neq j,\ i=\overline{1,N},\ j=\overline{1,N}. \tag{6.1}$$

Как правило, внедиагональные элементы матрицы Онзагера, как минимум, на 2 порядка меньше диагональных. В этом обстоятельстве и заключается основная трудность численного решения краевых задач для системы уравнений Онзагера. Действительно, для корректного расчета влияния членов, соответствующих внедиагональным элементам матрицы Онзагера, погрешность аппроксимации при применении традиционных численных методов конечных разностей или конечных элементов должна быть, как минимум, на два порядка меньше, чем величина упомянутых членов, что накладывает существенные ограничения на шаги по времени и по пространству. Ограниченные рамки данной работы не дают возможности подробно проанализировать возможные применения к данной задаче традиционных численных подходов, отметим лишь, что даже повышение порядка аппроксимации, например, до четвертого по пространственным производным и до третьего по времени, не всегда способно эффективно разрешить указанную проблему. Чтобы упростить дальнейшие рассуждения, сделаем физически обоснованное предположение о том, что диагональные элементы модифицированной матрицы Онзагера имеют один и тот же порядок, и внедиагональные элементы тоже имеют один и тот же порядок (учитывая, что λ_i также величины одного порядка, это предположение очевидно переносится на обычную матрицу Онзагера). Тогда:

$$\frac{\alpha'_{ij}}{\alpha'_{ii}} \sim \epsilon,\ i = \overline{1,N},\ j = \overline{1,N}; \tag{6.2}$$

где ϵ — малая величина, которая в дальнейшем будет использоваться в качестве малого параметра, то есть, $\alpha'_{ij} = \epsilon\alpha'^{*}_{ij}, \alpha'^{*}_{ij} \sim \alpha'_{ii}$. Согласно методу малого параметра решение задачи будем отыскивать в виде:

$$u_i = u_i^0 + \sum_{k=1}^{\infty} \epsilon^k u_i^k,\ i = \overline{1,N}; \tag{6.3}$$

где u_i^k — функции, подлежащие определению. Подставим разложение (6.3) в исходную постановку задачи и, приравняв нулю сумму коэффициентов при соответствующих степенях ϵ, получим:

$$\frac{\partial u_i^0}{\partial \tau} = \alpha'_{ii} \operatorname{div}\left[\lambda\left(u_j^0\right) \operatorname{grad}\left(u_i^0\right)\right],\ i = \overline{1,N},\ j = \overline{1,N}; \tag{6.4}$$

$$u_i^0\left(\tau = 0, X\right) = u_{i0}\left(X\right),\ i = \overline{1,N}; \tag{6.5}$$

$$u_i^0|_{\Gamma_{Ii}} = u_{ia},\ i = \overline{1,N}; \tag{6.6}$$

$$\lambda_i\left(u_i^0\right)\frac{\partial u_i^0}{\partial n}|_{\Gamma_{IIi}} = q_{ia},\ i = \overline{1,N}; \tag{6.7}$$

$$\lambda_i\left(u_i^0\right)\frac{\partial u_i^0}{\partial n}|_{\Gamma_{IIIi}} = \beta_i\left(u_i^0|_{\Gamma_{Ii}} - u_{i\alpha}\right),\ i = \overline{1,N}; \tag{6.8}$$

....

$$\frac{\partial u_i^k}{\partial \tau} = \alpha'_{ii} \operatorname{div}\left[\lambda_i\left(u_j^k\right) \operatorname{grad}\left(u_i^k\right)\right] + \sum_{\substack{l=1\\ l\neq i}}^{N} \alpha'^{*}_{ll} \operatorname{div}\left[\lambda_l\left(u_j^{k-1}\right) \operatorname{grad}\left(u_l^{k-1}\right)\right], \tag{6.9}$$

$$i = \overline{1,N},\ j = \overline{1,N};$$

$$u_i^k\left(\tau = 0, X\right) = 0,\ i = \overline{1,N}; \tag{6.10}$$

$$u_i^k|_{\Gamma_{Ii}} = 0,\ i = \overline{1,N}; \tag{6.11}$$

$$\lambda_i\left(u_i^k\right)\frac{\partial u_i^k}{\partial n}|_{\Gamma_{IIi}} = 0,\ i = \overline{1,N}; \tag{6.12}$$

$$\lambda_i\left(u_i^k\right)\frac{\partial u_i^k}{\partial n}|_{\Gamma_{IIIi}} = \beta_i u_i^k|_{\Gamma_{Ii}},\ i = \overline{1,N}; \tag{6.13}$$

....

здесь в λ_i u^k указывает, до какого члена выражения (6.3) вычисляется подстановка при расчете нелинейности. В отличие от исходной краевой задачи, полученная последовательность краевых задач (6.4) – (6.13) не содержит малых параметров и может быть решена численно одним из известных численных методов на достаточно грубых сетках.

7. Схема численного решения

Для решения краевых задач (6.4) – (6.13) может быть использован любой численный метод решения уравнения теплопроводности [10]. В частности, в настоящей работе использован метод конечных разностей [11]. Решение ищем для уравнения

$$\begin{gathered}\frac{\partial u_i^k}{\partial \tau} = \alpha_{ii}^{'}\frac{1}{H_1H_2H_3}\left[\frac{\partial}{\partial \xi_1}\left(\frac{H_2H_3}{H_1}\lambda_i\left(u_j^k\right)\frac{\partial u_j^k}{\partial \xi_1}\right)+\right.\\ \left.\frac{\partial}{\partial \xi_2}\left(\frac{H_1H_3}{H_2}\lambda_i\left(u_j^k\right)\frac{\partial u_j^k}{\partial \xi_2}\right)+\frac{\partial}{\partial \xi_3}\left(\frac{H_1H_2}{H_3}\lambda_i\left(u_j^k\right)\frac{\partial u_j^k}{\partial \xi_3}\right)\right]+\\ +\sum_{l=1}^{N}\alpha_{ij}^{'*}\frac{1}{H_1H_2H_3}\left[\frac{\partial}{\partial \xi_1}\left(\frac{H_2H_3}{H_1}\ \lambda_i\left(u_j^{k-1}\right)\frac{\partial u_j^{k-1}}{\partial \xi_1}\right)+\right.\\ \left.+\frac{\partial}{\partial \xi_2}\left(\frac{H_1H_3}{H_2}\lambda_i\left(u_j^{k-1}\right)\frac{\partial u_j^{k-1}}{\partial \xi_2}\right)+\frac{\partial}{\partial \xi_3}\left(\frac{H_1H_2}{H_3}\lambda_i\left(u_j^k\right)\frac{\partial u_j^k}{\partial \xi_3}\right)\right],\end{gathered} \tag{7.1}$$

где ξ_1, ξ_2, ξ_3 — координаты в некоторой, вообще говоря, криволинейной системе, H_1, H_2, H_3— коэффициенты Ляме той же системы координат, при помощи явной разностной схемы второго порядка точности по пространству и первого порядка точности по времени [11].

8. Анализ полученных результатов

Чтобы проиллюстрировать предложенный подход, была выбрана простейшая краевая задача для системы уравнений Онзагера, состоящей из двух уравнений, в одномерной по пространству среде с постоянными свойствами. То есть:

$$\begin{cases}\dfrac{\partial u_1}{\partial \tau} = \alpha_{11}\dfrac{\partial^2 u_1}{\partial x^2} + \alpha_{12}\dfrac{\partial^2 u_2}{\partial x^2},\\ \dfrac{\partial u_2}{\partial \tau} = \alpha_{21}\dfrac{\partial^2 u_1}{\partial x^2} + \alpha_{22}\dfrac{\partial^2 u_2}{\partial x^2};\end{cases} \tag{8.1}$$

$$u_1\,(\tau = 0) = C_1 \neq 0; \tag{8.2}$$

$$u_2\,(\tau = 0) = 0; \tag{8.3}$$

$$u_1\,(x = x_1) = C_2 \neq C_1; \tag{8.4}$$

$$u_1\,(x = x_2) = C_2; \tag{8.5}$$

$$u_2\,(x = x_1) = 0; \tag{8.6}$$

$$u_2\,(x = x_2) = 0. \tag{8.7}$$

Результаты приведенных расчетов численного решения задачи (8.1) – (8.7) при помощи предложенного выше алгоритма представлены на рисунках 1 и 2. Изменения функции u_1 в зависимости от времени соответствуют пове-

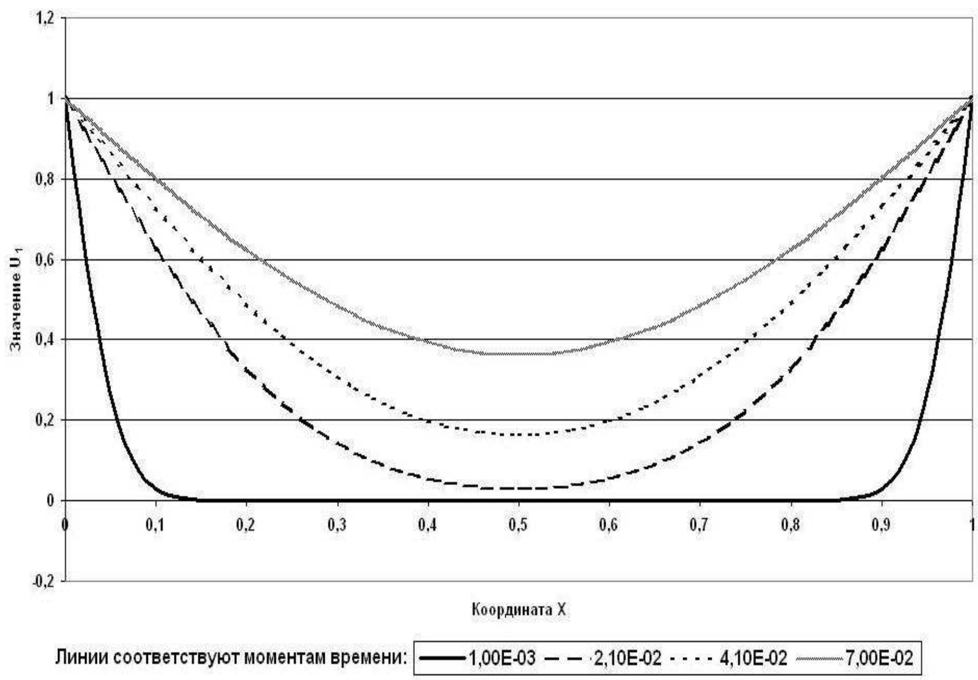

Рис. 1. Зависимость функции u_1 в нулевом приближении от координаты x в разные моменты времени τ.

дению решения уравнения теплопроводности. Однако в графиках функции u_2 наблюдаются два максимума, движущихся по направлению к середине расчетной области, которые затем сливаются в один. Подобная неоднородность, не присущая решениям линейных параболических задач, является специфической особенностью решений системы уравнений Онзагера.

9. Выводы

Приведенные иллюстративные расчеты подтверждают высокую вычислительную эффективность предложенного подхода. Малость параметра позволяет ограничиться нулевым и последующими двумя приближениями. Не меньшим достоинством предложенного подхода является его универсальность.

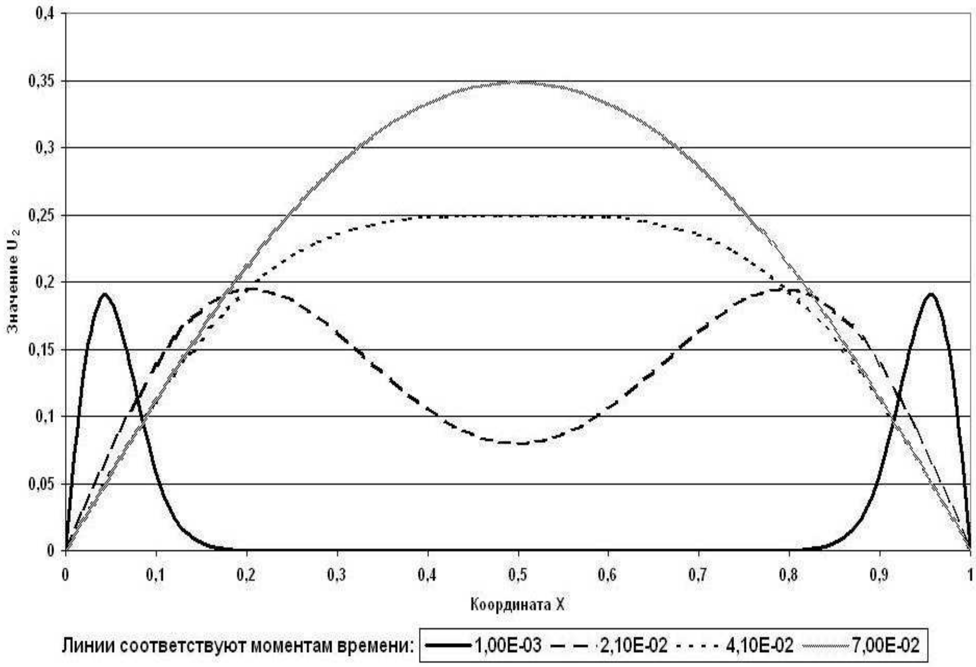

Рис. 2. Зависимость функции u_2 в первом приближении от координаты x в разные моменты времени τ.

К числу недостатков предложенного подхода относится нерешенный вопрос о сходимости ряда (6.3). Следует отметить, что нерешенная проблема сходимости асимптотических разложений является общим недостатком большинства асимптотических подходов. Как правило, если теоретически доказать сходимость не удается, ограничиваются проверкой практической сходимости построенного решения. Отметим, что практическая сходимость в рассматриваемом численном примере, безусловно, имеет место. В силу малости параметра ϵ для теоретического доказательства сходимости разложения (6.3) достаточно показать ограниченность функций u_i^k, что с физической точки зрения является совершенно оправданным предположением. Однако, например, для случая несогласованных граничных и начальных условий в начальный момент времени производные искомых функций не ограничены, то есть, ряд (6.3) расходится. В целом, определение ограничений, которые следует наложить на начальную постановку задачи, чтобы асимптотические разложения сходились, заслуживает специального отдельного исследования. Проблему сходимости ряда (6.3) осложняет нелинейность исходной краевой задачи, то есть возможная неединственность решения, а при неединственном решении, вообще говоря, не ясно, к какому решению будет сходиться ряд. Перспективы дальнейшего использования и развития предложенного подхода совершенно очевидны, поскольку он предоставляет возможность высокоэффективного расчета рассматриваемых процессов, что позволяет использовать его при решении широкого спектра соответствующих прикладных задач. Следует отметить, что предложенный подход также дает возможность работать с определенными обобщениями системы уравнений Онзагера, например, включающими нелинейности коэффициентов, что создает дополнительные перспективы его использования как в теоретических, так и в практических исследованиях. Развитие самого же предложенного подхода видится, прежде всего, в его распространении на случаи иных, более сложных обобщений системы уравнений Онзагера и краевых задач для нее.

Библиографические ссылки

1. *Лыков А. В.* Тепломассообмен (Справочник)/ А. В. Лыков. — М. : Энергия, 1971. — 560 с.
2. *Бевза Э. К., Евдокимов Д. В.* Математическое моделирование медленно протекающих процессов тепломассообмена в условиях микрогравитации // Зб. тез Міждержавної конференції "Комп'ютерне моделювання", 30 червня – 2 липня 1999, Дніпродзержинськ. — С. 32–33.
3. *Лыков А. В.* Теория сушки/ А. В. Лыков. — М. : Энергия, 1968. — 472 с.
4. *Евдокимов Д. В.* Интегральные уравнения процесса сушки капиллярнопористого тела // Диференціальні рівняння та їх застосування. Дніпропетровськ : ДДУ, 1998.— С. 52–55.
5. *Бевза Э. К., Евдокимов Д. В., Кочубей А. А.* Математическое моделирование процессов фазовых переходов в условиях микрогравитации // Вестник Донец./ ун-та. Серия А. Естественные науки, 2002, № 2. — С. 249–253.
6. *Mazur P.* Non-equilibrium thermodynamics/ P. Mazur. — Dover publications, inc., New York — 510 p.
7. *Пригожин И.* Введение в термодинамику необратимых процессов/ И. Пригожин — Ижевск : НИЦ "Регулярная и хаотическая динамика 2001. — 160 с.
8. *Полежаев В. И., Бело М. С., Верезуб Н. А. и др.* Конвективные процессы в невесомости/ В. И. Полежаев — М. : Наука, 1991. — 240 с.
9. *Евдокимов Д. В., Поляков Н. В.* Граничные интегральные уравнения процессов фильтрационно-диффузионного тепломассопереноса в пористой среде // "Метод дискретных особенностей в задачах аэродинамики, электродинамики и теории дифракции", Тр. VII Международ. симп. "Метод дискретных особенностей в задачах математической физики", 26–29 июня 1997, Феодосия, С. 58–61.
10. *Беляев Н. М., Рядно А.А.* Методы теории теплопроводности / Н. М. Беляев, А. А. Рядно. — М. : Высшая школа, 1982. — Т. 1. — 327 с., Т. 2. — 304 с.
11. *Самарский, А. А.* Теория разностных схем /А. А. Самарский. — М. : Наука, 1989.— 576 с.

Надійшла до редакції 01.04.2010