

ФАЗОВОЕ ПРОСТРАНСТВО ЛИНЕЙНОЙ МОДЕЛИ РЕАКЦИИ И ДИФФУЗИИ В ТРУБЧАТОМ РЕАКТОРЕ

И.А. Плюхина

PHASE SPACE OF DEGENERATE MODEL OF REACTION AND DIFFUSION IN A TUBE REACTOR

I.A. Plyuhina

Описано фазовое пространство вырожденной линейной модели реакции и диффузии в трубчатом реакторе

Ключевые слова: фазовое пространство, уравнения реакции-диффузии, относительно p -секториальные операторы и вырожденные аналитические полугруппы операторов

Phase space of degenerate linear model of reaction and diffusion in a tube reactor is described

Keywords: phase space, reaction-diffusion equations, relatively p -sectorial operators and degenerate analytical semigroups of operators

Введение

В 1958 г. А.А. Белоусов опубликовал сообщение о необычной химической реакции окисления лимонной кислоты броматом калия в присутствии катализатора – паров трех- и четырехвалентного церия. Необычность этой реакции заключалась в том, что реагенты вместо того, чтобы прореагировать с образованием нового вещества, создали своего рода «химические часы»: а именно, раствор с реагентами периодически менял цвет с красного на синий и наоборот. Работа Белоусова была продолжена и развита А.М. Жаботинским, который обнаружил возникновение спиральных волн в первоначально однородной химической смеси. К настоящему времени известно множество реакций Белоусова – Жаботинского, которые обычно происходят при 25 °С в реакционной смеси, состоящей из бромата калия, маноловой или бромманоловой кислоты и сульфата церия или эквивалентного вещества, растворимого в лимонной кислоте.

Механизм этих реакций, в результате которых возникают упорядоченные временные и (или) пространственные структуры, до конца не изучен до сих пор, однако многое удалось понять, исследуя качественно и численно математические модели в виде так называемых систем уравнений «реакция-диффузия» [1]

$$\begin{cases} v_t = \alpha v_{xx} + f(v, w), \\ w_t = \beta w_{xx} + g(v, w). \end{cases} \quad (0.1)$$

Здесь $v = v(x, t)$ и $w = w(x, t)$ – функции, характеризующие концентрации реагентов, вторые производные по x , согласно закону Фика, характеризуют диффузию реагентов ($\alpha, \beta \in \mathbb{R}_+$ – коэффициенты диффузии), вектор-функции f и g отвечают за взаимодействие реагентов. В результате качественного и численного анализа простейших моделей реакции-диффузии вида (0.1) были обнаружены феномены возникновения временных и пространственных структур.

Качественный анализ систем уравнений (0.1) в предположении, что скорость изменения одной из концентраций существенно превосходит скорость другой, был сделан в [2]. Это предположение приводит к системам уравнений вида

$$\begin{cases} v_t = \alpha v_{xx} + f(v, w), \\ 0 = \beta w_{xx} + g(v, w). \end{cases} \quad (0.2)$$

Нашей целью является изучение фазового пространства линеаризованной системы (0.2) вида

$$\begin{cases} v_t = \alpha v_{xx} + a_{11}v + a_{12}w, \\ 0 = \beta w_{xx} + a_{21}v + a_{22}w, \end{cases} \quad (0.3)$$

заданной на геометрическом графе. Уравнения (0.2), (0.3) в подходящем образом подобранных функциональных пространствах редуцируются к линейному уравнению соболевского типа

$$Li = Mu, \quad (0.4)$$

которое затем исследуется методами теории уравнений соболевского типа и вырожденных полугрупп операторов [3], гл. 3. Эта теория к настоящему времени апробирована в различных аспектах [4, 5], однако к данной ситуации применяется впервые.

Дифференциальные уравнения на графах – сравнительно новая область математического знания. Первая монография в этой области [6] вышла в 2004 году (см. там прекрасный очерк истории вопроса). Первая работа по уравнениям соболевского типа на геометрических графах [7] вышла в 2002 г. Первая диссертация, в которой описаны фазовые пространства линейных и полулинейных уравнений соболевского типа на графах [8], защищена в 2005 г. В данной статье впервые рассмотрены системы дифференциальных уравнений на геометрическом графе.

Статья кроме введения и списка литературы содержит два параграфа. В первом описана редукция уравнений (0.3) на геометрическом графе к уравнению (0.4). Во втором дается описание фазового пространства данного уравнения. Список литературы отражает лишь вкусы и пристрастия автора и не претендует на полноту.

1. Постановка задачи

Пусть $\mathbf{G} = \mathbf{G}(\mathfrak{V}; \mathfrak{E})$ – конечный связный ориентированный граф, где $\mathfrak{V} = \{V_i\}$ – множество вершин, а $\mathfrak{E} = \{E_j\}$ – множество дуг. Мы предполагаем, что каждая дуга E_j имеет длину $l_j > 0$ и площадь поперечного сечения $d_j > 0$. Сначала на графе \mathbf{G} рассмотрим уравнения Штурма – Лиувилля

$$\varphi_{jxx} = \lambda \varphi_j. \quad (1.1)$$

Наша первая цель – изучение решений уравнений (1.1), удовлетворяющих «условию непрерывности» в вершинах графа

$$\begin{aligned} \varphi_j(0, t) = \varphi_k(0, t) = \varphi_m(l_m, t) = \varphi_n(l_n, t); \\ E_j, E_k \in E^\alpha(V_i); \quad E_m, E_n \in E^\omega(V_i) \end{aligned} \quad (1.2)$$

и «условию баланса потоков»

$$\sum_{E_j \in E^\alpha(V_i)} d_j \varphi_{jx}(0, t) - \sum_{E_j \in E^\omega(V_i)} d_j \varphi_{jx}(l_j, t) = 0, \quad (1.3)$$

где через $E^{\alpha(\omega)}(V_i)$ обозначено множество ребер с началом (концом) в вершине V_i . Если граф \mathbf{G} содержит только одно нециклическое ребро (т.е. всего две вершины), то условия

(1.2) отсутствуют, а условия (1.3) превращаются в условия Неймана. Если же это ребро циклическое (т.е. только одна вершина у графа \mathbf{G}), то условия (1.2), (1.3) превращаются в условия согласования. Заметим еще, что в контексте условий (1.2) «отсутствовать» не значит «быть равным нулю». Например, если в вершину V_i все ребра «входят», то первые два равенства в (1.2) именно «отсутствуют», а не «равны нулю».

Введем в рассмотрение множество $L_2(\mathbf{G}) = \{g = (g_1, g_2, \dots, g_j, \dots) : g_j \in L_2(0, l_j)\}$. Множество $L_2(\mathbf{G})$ является гильбертовым пространством со скалярным произведением

$$\langle g, h \rangle = \sum_{E_j \in \mathfrak{E}} d_j \int_0^{l_j} g_j h_j dx.$$

Через \mathfrak{W} обозначим множество $\mathfrak{W} = \{w = (w_1, w_2, \dots, w_j, \dots) : w_j \in W_2^1(0, l_j) \text{ и выполнено (1.2)}\}$. Множество \mathfrak{W} является банаховым пространством с нормой

$$\|w\|_{\mathfrak{W}}^2 = \sum_{E_j \in \mathfrak{E}} d_j \int_0^{l_j} (w_{jx}^2 + w_j^2) dx.$$

В силу теорем вложения Соболева пространство $W_2^1(0, l_j)$ состоит из абсолютно непрерывных функций, а значит пространство \mathfrak{W} корректно определено, плотно и компактно вложено в $L_2(\mathbf{G})$. отождествим $L_2(\mathbf{G})$ со своим сопряженным, и через \mathfrak{H} обозначим сопряженное относительно двойственности $\langle \cdot, \cdot \rangle$ пространство к \mathfrak{W} . Очевидно, \mathfrak{H} – банахово пространство, причем вложение $\mathfrak{W} \hookrightarrow \mathfrak{H}$ компактно.

Формулой

$$\langle A\varphi, \psi \rangle = \sum_{E_j \in \mathfrak{E}} d_j \int_0^{l_j} \varphi_{jx} \psi_{jx} dx$$

определим оператор $A : \mathfrak{W} \rightarrow \mathfrak{H}$. Справедлива следующая [9]:

Теорема 1. *Оператор $A \in \mathcal{L}(\mathfrak{W}; \mathfrak{H})$, причем спектр $\sigma(A)$ оператора A дискретен, конечнократен и сгущается только к $+\infty$.*

Заметим, что первое собственное значение оператора A равно нулю, и это значение однократно. Действительно,

$$\langle A\chi, \chi \rangle = \sum_{E_j \in \mathfrak{E}} d_j \int_0^{l_j} \chi_{jx}^2 dx \geq 0$$

при всех $\chi \in \mathfrak{W}$ и равно нулю только для таких $\chi = (\chi_1, \chi_2, \dots, \chi_j, \dots)$, что $\chi_1 = \chi_2 = \dots = \chi_j = \dots = \text{const}$. Введем в рассмотрение нормированную в смысле $L_2(\mathbf{G})$ собственную функцию оператора A

$$\chi_1 = \left(\sum_{E_j \in \mathfrak{E}} d_j l_j \right)^{-1/2} (1, 1, \dots, 1, \dots),$$

отвечающую первому (нулевому) собственному значению. Через $\{\lambda_k\}_{k=2}^{\infty}$ обозначим семейство собственных значений оператора A , занумерованное по неубыванию с учетом их кратности; а через $\{\chi_k\}_{k=2}^{\infty}$ обозначим соответствующие ортонормированные в смысле $L_2(\mathbf{G})$ собственные функции.

Теперь на графе \mathbf{G} рассмотрим системы уравнений

$$\begin{cases} v_{jt} = \alpha v_{jxx} + a_{11}v_j + a_{12}w_j, \\ 0 = \beta w_{jxx} + a_{21}v_j + a_{22}w_j, \end{cases} \quad (1.4)$$

причем каждая функция v_j и w_j удовлетворяет условиям (1.2), (1.3). Чтобы редуцировать (1.2) – (1.4) к уравнению (0.4), зададим пространства $\mathfrak{U} = L_2(\mathbf{G}) \times L_2(\mathbf{G})$, $\mathfrak{F} = \mathfrak{H} \times \mathfrak{H}$ и определим операторы

$$\begin{aligned} [Lu, \zeta] &= \langle v, \xi \rangle, \\ [Mu, \zeta] &= \langle (-\alpha A + a_{11})v + a_{12}w, \xi \rangle + \langle (-\beta A + a_{22})w + a_{21}v, \eta \rangle. \end{aligned} \quad (1.5)$$

Здесь $u = (v, w)$, $\zeta = (\xi, \eta)$, $u, \zeta \in \mathfrak{W} \times \mathfrak{W}$, а $[\cdot, \cdot]$ – скалярное произведение в \mathfrak{U} , т.е.

$$[u, \zeta] = \langle v, \xi \rangle + \langle w, \eta \rangle.$$

Теорема 2. Оператор $L \in \mathcal{L}(0\mathfrak{U}, \mathfrak{F})$, $\ker L = \{0\} \times \mathfrak{H}$, $\text{im } L = \mathfrak{H} \times \{0\}$, а оператор $M \in \mathcal{Cl}(\mathfrak{U}, \mathfrak{F})$, $\text{dom } M = \mathfrak{W} \times \mathfrak{W}$.

Доказательство. Непрерывность оператора L , а также утверждения о его ядре и образе очевидны. Замкнутость и плотная определенность оператора M вытекает из непрерывности оператора $A \in \mathcal{L}(\mathfrak{W}, \mathfrak{H})$ (теорема 1), а также плотности и непрерывности вложения $\text{dom } M \hookrightarrow \mathfrak{U}$. \square

2. Фазовое пространство

Поиски фазового пространства начнем с вычисления L -спектра оператора M , где операторы L и M определены выше. Итак,

$$\sigma^L(M) = \{\mu_k = a_{11} - \alpha\lambda_k + a_{12}a_{21}(\beta\lambda_k - a_{22})^{-1}, k \in \mathbb{N} \setminus \{l : \beta\lambda_l = a_{22}\}\}.$$

В силу теоремы 1 справедлива

Лемма 1. При любых $\alpha \in \mathbb{R}_+$, $\beta, a_{kl} \in \mathbb{R}$, $k, l = 1, 2$, L -спектр $\sigma^L(M)$ оператора M дискретен, конечнократен и сгущается только к $-\infty$.

Найдем L -резольвенту оператора M ,

$$\begin{aligned} (\mu L - M)^{-1} &= \sum_{k=1}^{\infty} [\mu(\beta\lambda_k - a_{22}) + (\alpha\lambda_k - a_{11})(\beta\lambda_k - a_{22}) - a_{12}a_{21}]^{-1} \times \\ &\times \begin{pmatrix} \beta\lambda_k - a_{22} & a_{12} \\ a_{21} & \mu + \alpha\lambda_k - a_{11} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle \cdot, \chi_k \rangle \chi_k \\ \langle \cdot, \chi_k \rangle \chi_k \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Теперь, используя понятия и методы [3], гл. 3, получим следующий результат

Лемма 2. При любых $\alpha \in \mathbb{R}_+$, $\beta \in \mathbb{R}$, $a_{kl} \in \mathbb{R}$, $k, l = 1, 2$ таких, что $\beta^{-1}a_{22} \notin \sigma(A)$ и $a_{21} \neq 0$, оператор M сильно $(L, 0)$ -секториален, причем пространства \mathfrak{U} и \mathfrak{F} расщепляются в прямые суммы $\mathfrak{U} = \mathfrak{U}^0 \oplus \mathfrak{U}^1$ и $\mathfrak{F} = \mathfrak{F}^0 \oplus \mathfrak{F}^1$, где

$$\mathfrak{U}^0 = \{0\} \times L_2(\mathbf{G}), \quad \mathfrak{F}^1 = \mathfrak{H} \times \{0\},$$

$$\mathfrak{U}^1 = \{u \in \mathfrak{U} : u = \text{col}(a_{21}^{-1}(\beta A - a_{22})\varphi, \varphi), \varphi \in \mathfrak{W}\},$$

$$\mathfrak{F}^0 = \{f \in \mathfrak{F} : f = \text{col}(a_{12}\varphi, (a_{22} - \beta A)\varphi), \varphi \in \mathfrak{W}\}.$$

Итак, в силу определения фазового пространства (см. [3], гл. 3) справедлива

Теорема 3. При любых $\alpha \in \mathbb{R}_+$, β , $a_{kl} \in \mathbb{R}$, $k, l = 1, 2$, таких, что $\beta^{-1}a_{22} \notin \sigma(A)$ и $a_{21} \neq 0$ фазовым пространством уравнений (1.4), (1.2), (1.3) служит подпространство \mathcal{U}^1 .

В заключение автор считает своим приятным долгом выразить искреннюю признательность проф. Г.А. Свиридюку за постановку задачи и обсуждение результатов.

Литература

1. Пригожин, И. От существующего к возникающему / И. Пригожин. – М: URSS, 2006.
2. Бокарева, Т.А. Сборки Уитни фазовых пространств некоторых полулинейных уравнений типа Соболева / Т.А. Бокарева, Г.А. Свиридюк // Матем. заметки. – 1994. – Т. 5, № 3. – С. 3 – 10.
3. Sviridyuk, G.A. Linear Sobolev Type Equations and Degenerate Semigroups of Operators / G.A. Sviridyuk, V.E. Fedorov. – Utrecht; Boston; Koln; Tokyo: VSP, 2003.
4. Замышляева, А.А. Фазовые пространства одного класса линейных уравнений соболевского типа / А.А. Замышляева // Вычислит. технологии. – 2003. – Т. 8, № 4. – С. 45 – 54.
5. Загребина, С.А. О задаче Шоуолтера – Сидорова / С.А. Загребина // Изв. вузов. Математика – 2007. – № 3. – С. 22 – 28.
6. Покорный, Ю.В. Дифференциальные уравнения на геометрических графах / Ю.В. Покорный, О.М. Пенкин, В.Л. Прядиев. – М.: Физматлит, 2004.
7. Свиридюк, Г.А. Уравнения соболевского типа на графах / Г.А. Свиридюк // Неклассические уравнения математической физики. Новосибирск, 2002. – С. 221 – 225.
8. Шеметова, В.В. Исследование одного класса уравнений соболевского типа на графах: дис. ... канд. физ.-мат. наук / В.В. Шеметова. – Магнитогорск: МаГУ, 2005. – 109 с.
9. Баязитова, А.А. Обобщенная задача Штурма – Лиувилля на графе / А.А. Баязитова // Воронеж. зим. мат. школа С.Г. Крейна - 2010: тез. докл. Воронеж, 2010. – С. 18 – 19.

Кафедра уравнений математической физики,
Южно-Уральский государственный университет
rolovinochka_88@mail.ru

Поступила в редакцию 17 февраля 2010 г.