О ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОМ УРАВНЕНИИ ДЛЯ КОНЦЕНТРАЦИИ КОМПОНЕНТЫ ОДНОМЕРНОГО СТАЦИОНАРНОГО ПОТОКА В ХИМИЧЕСКОМ РЕАКТОРЕ

Д. МОЛНАРКА, Л. ФАИ, Р. Х. ФАРЗАН

Кафедра Вычислительной Математики Университета им. Л. Этвеша

(Поступило 1. 3. 1976)

Результаты настоящей работы были получены при исследовании и решении краевой задачи для квазилинейного дифференциального уравнения, описывающего процесс, происходящий в химическом реакторе при выщелачивании боксита. Необходимость исследования существования и единственности решения, а также сходимости выбранного итерационного процесса появилась в связи с тем, что известные теоремы о существовании и единственности (см. например, [1], [2]), о сходимости решений последовательности краевых задач для квазилинеаризованных уравнений (см. [3]) оказались здесь неприменимыми. Эти теоремы приводят достаточные условия существования и единственности и соответственно сходимости, которые в наших уравнениях вообще говоря не выполняются.

В настоящей работе приведены достаточные условия существования и единственности решения краевой задачи, существования и сходимости итерационного процесса, которые являются естественными для рассматриваемого типа реакций в химических реакторах, а также показаны области значений решений.

1. Уравнения, описывающие изменение концентрации $u(x)$ в процессе установившейся реакции в одномерном случае, являются квазилинейными со слабой нелинейностью дифференциальными уравнениями второго порядка и имеют вид [4]:

$$(1.1)\qquad \frac{D}{Pe}u''+\left(\frac{D'}{Pe}-v\right)u'-v'u+f(x,u)=0\,,\quad x\in[0,1]\,,$$

где $D(x)>0$, $v(x)>0$ — безразмерные коэффициент диффузии и скорость, отнесенные к масштабным постоянным D_0 и v_0, непрерывные вместе с первыми производными, Pe — безразмерное число Пекле:

$$Pe = \frac{v_0 l}{D_0},$$

где l — длина реактора.

Рассматривается первая краевая задача: уравнение (1.1) и граничные условия:

$$u(0) = d_1, \quad u(1) = d_2, \quad 0 \leq d_1 < d_2 \leq 1\,. \tag{1.2}$$

Функция источника $f(x, u)$ для химических реакций второго рода определена в области $[0, 1] \times [0, 1]$ и удовлетворяет следующим условиям:

(1.3)
а) $f(x, u) \geq 0$, непрерывна по x и u и невозрастающая по u,
б) $f(x, 0) > 0$,
в) $f(x, 1) = 0$.

Продолжим функцию $f(x, u)$ на всю полосу $0 \leq x \leq 1$ вдоль прямой u:

$$\begin{aligned} f(x,u) &= f(x,0) > 0 \quad \text{при} \quad u < 0\,, \\ f(x,u) &= f(x,1) = 0 \quad \text{при} \quad u > 1\,. \end{aligned} \tag{1.4}$$

Уравнение (1.1) не удовлетворяет достаточным условиям для существования решения нелинейной краевой задачи ([2], [1]). Вопрос об условиях существования решения задачи (1.1), (1.2) мы рассмотрим ниже (Теорема 6). Покажем сейчас достаточные условия единственности решения этой краевой задачи.

Теорема 1. Для единственности решения краевой задачи (1.1), (1.2) достаточно, чтобы для $v(x)$ выполнялось условие:

$$v'(x) \geq 0\,. \tag{1.5}$$

Доказательство проведем от противного. Пусть уравнение (1.1) с граничными условиями (1.2) имеет по крайней мере два решения: u_1, u_2. Тогда для них:

$$\frac{D}{Pe} \cdot u_1'' + \left(\frac{D'}{Pe} - v\right) u_1' - v' u_1 + f(x, u_1) = 0\,,$$

$$u_1(0) = d_1, \quad u_1(1) = d_2\,,$$

$$\frac{D}{Pe} \cdot u_2'' + \left(\frac{D'}{Pe} - v\right) u_2' - v' u_2 + f(x, u_2) = 0\,,$$

$$u_2(0) = d_1, \quad u_2(1) = d_2\,.$$

Вычтем первое уравнение из второго и обозначим $w = u_2 - u_1$. Тогда для $w(x)$ получим уравнение:

$$\frac{D}{Pe}\, w'' + \left(\frac{D'}{Pe} - v\right) w' - v' w + f(x, u_2) - f(x, u_1) = 0\,,$$

с граничными условиями

$$w(0) = w(1) = 0\,.$$

Умножим это уравнение на w, перегруппируем члены и проинтегрируем по x:

$$\int_0^1 \left(\frac{D}{Pe} w'' + \frac{D'}{Pe} w'\right) w\,dx - \int_0^1 (vw' + v'w)\,w\,dx +$$

$$+ \int_0^1 (f(x, u_2) - f(x, u_1))\,w\,dx = 0\,. \tag{1.6}$$

В первых двух скобках полные производные. Интегрируем их по частям и используем граничные условия для w:

$$\int_0^1 (Dw')'\,w\,dx = -\int_0^1 D\,w'^2\,dx\,,$$

$$-\int_0^1 (vw)'\,w\,dx = \int_0^1 vww'\,dx = \int_0^1 v\frac{1}{2}(w^2)'\,dx = -\frac{1}{2}\int_0^1 v'\,w^2\,dx\,.$$

Теперь уравнение (1.6) перепишется в виде:

$$-\frac{1}{Pe}\int_0^1 Dw'^2\,dx - \frac{1}{2}\int_0^1 v'\,w^2\,dx +$$

$$+ \int_0^1 (f(x, u_2) - f(x, u_1))(u_2 - u_1)\,dx = 0\,. \tag{1.7}$$

В силу того, что $f(x, u)$ невозрастающая функция, третий интеграл не положительный. Так как $D(x) > 0$, то при $v'(x) \geq 0$ уравнение (1.6) может выполняться только при условии $w'(x) = 0$, $x \in [0, 1]$, т.е. $w = \mathrm{Const}$. Отсюда, в соответствии с граничными условиями, $w(x) = 0$, $x \in [0, 1]$. Это и доказывает теорему.

Отметим, что условие (1.5) достаточно естественно. При химических реакциях такого рода скорость потока остается практически неизменной и может несколько возрастать с увеличением температуры, наблюдаемым в таких реакторах.

В дальнейшем будем полагать, что условие (1.5) выполнено.

2. В дальнейшем нам будут полезны две следующие леммы, при доказательстве которых используется модификация метода дифференциальных неравенств [5]. Рассмотрим линейный функционал:

$$Lu = \frac{1}{Pe} Du'' + \left(\frac{1}{Pe} D' - v \right) u' - v' u . \tag{2.1}$$

Лемма 1. Решения $u(x)$ функционального неравенства

$$Lu \geq 0 \tag{2.2}$$

при $u > 0$ не могут иметь локальных максимумов, кроме случая $u(x) = \text{Const}$ во всем интервале $[\bar{a}, \bar{b}]$, в котором выполняется неравенство (2.2).

Решения строгого неравенства

$$Lu > 0 \tag{2.3}$$

не имеют локальных максимумов при $u \geq 0$.

Лемма 2. Решения $u(x)$ функционального неравенства

$$Lu \leq 0 \tag{2.4}$$

при $u < 0$ не могут иметь локальных минимумов, кроме случая $u(x) = \text{Const}$ во всем интервале $[\bar{a}, \bar{b}]$, в котором выполняется неравенство (2.4).

Решения строгого неравенства

$$Lu < 0 \tag{2.5}$$

не имеют локальных минимумов при $u \leq 0$.

Мы приведем только доказательство Леммы 1. Лемма 2 доказывается совершенно аналогично.

Доказательство проведем от противного. Сначала рассмотим случай (2.3). Пусть u есть некоторое решение этого неравенства, которое имеет локальный максимум в точке $\bar{x}$, в которой $u(\bar{x}) \geq 0$. Тогда $u'(\bar{x}) = 0$. Рассматривая неравенство (2.3) в этой точке $\bar{x}$, получим:

$$\frac{1}{Pe} D(\bar{x})\, u''(\bar{x}) > v'(\bar{x})\, u(\bar{x}) \geq 0 .$$

Однако, в этом неравенстве слева — величина меньшая или равная нулю. Это противоречие доказывает вторую часть леммы.

Пусть теперь

$$Lu \geq 0 , \tag{2.6}$$

причем, $u > 0$. Если u имеет максимум в точке $\bar{x}$, то выберем по обе стороны от нее точки a, b $(a < b)$, $[a, b] \subseteq [\bar{a}, \bar{b}]$, в которых $u(a) = u(b) \geq 0$. Перегруппируем члены в операторе Lu и проинтегрируем (2.6) по x от a до b:

$$\int_a^b \frac{1}{Pe} (Du'' + D' u')\, dx - \int_a^b (vu' + v' u)\, dx \geq 0 .$$

Под интегралами получаются полные дифференциалы, поэтому:

$$\frac{1}{Pe}(Du')\Big|_a^b \geq \nu u\Big|_a^b,$$

или,

$$\frac{1}{Pe}(D(b)\,u'(b) - D(a)\,u'(a)) \geq \nu(b)\,u(b) - \nu(a)\,u(a). \tag{2.7}$$

Так как $\nu'(x) \geq 0$ и $u(b) = u(a) \geq 0$, справа в (2.7) величина не меньшая нуля. Если a и b выбраны так, что в интервале $[a, b]$ нет других экстремумов, то для u' имеем:

$$u'(a) \geq 0, \quad u'(b) \leq 0.$$

Поэтому неравенство (2.7) (точнее, случай равенства) может выполняться только при $u'(a) = u'(b) = 0$. В силу произвольности выбора пары точек a, b это приводит к равенству

$$u'(x) = 0, \quad x \in [a, b],$$

и для $u(x)$ получаем:

$$u(x) = \mathrm{Const}, \quad x \in [a, b].$$

С другой стороны, поскольку мы предполагаем наличие локального максимума, частным случаем которого является $u(x) = \mathrm{Const}$, $x \in [a, b]$, в силу произвольности выбора точек a, b, можно их раздвигать вплоть до границ интервала $[\bar{a}, \bar{b}]$, в котором выполняется неравенство (2.2). На всем этом интервале функция $u(x)$ должна оставаться постоянной. Значит, функция $u(x)$ на всем интервале $[\bar{a}, \bar{b}]$ или возрастает (не убывает), или убывает (не возрастает), или остается постоянной. Таким образом, Лемма 1 доказана.

Рассмотрим теперь область значений и поведение решения краевой задачи (1.1), (1.2). Покажем, что $0 \leq u(x) \leq 1$.

Теорема 2. При выполнении условий (1.5) область значений решения $u(x)$ уравнения (1.1) с граничными условиями (1.2) ограничена интервалом $[0, 1]$, причем нижняя граница достигается только при $d_1 = 0$.

Доказательство. Допустим от противного, что на некотором интервале $u(x) > 1$. Тогда, вследствие (1.2) и предполагая, что $u(x)$ непрерывна, должны существовать точки a, b, такие, что $u(a) = u(b) = 1$ и $u(x) > 1$, $x \in (a, b)$. Таким образом, $u(x)$ имеет максимум внутри интервала $[a, b]$. Однако, вследствие (1.4) $f(x, u)$ в этом интервале равно нулю, и уравнение (1.1) принимает вид:

$$Lu = 0.$$

Так как на основании Леммы 1 в этом случае $u(x)$ может быть только постоянной на всем интервале $[a, b]$, и, значит, равной единице, мы пришли к противоречию с предположением $u > 1$. Следовательно, на всем интервале $[0, 1]$,

$$u(x) \leq 1 . \tag{2.8}$$

Покажем теперь, что $u \geq 0$. Допустим от противного, что на некотором интервале $u(x) < 0$. Тогда, вследствие (1.2), должны существовать точки a, b такие, что $u(a) = u(b) = 0$ и $u(x) < 0, x \in (a, b)$. Таким образом, $u(x)$ имеет локальный минимум при $x \in [a, b]$. Однако, вследствие (1.4), $f(x, u)$ в этом интервале больше нуля, поэтому функция $u(x)$ должна удовлетворять строгому неравенству (2.5), и согласно Лемме 2, $u(x)$ не может иметь локального минимума в интервале $[a, b]$. Следовательно,

$$u(x) \geq 0 , \tag{2.9}$$

причем легко видеть, что равенство возможно только при $d_1 = 0$ в точке $x = 0$.

Таким образом, теорема доказана. Из этой теоремы между прочим следует, что продолжение функции источника $f(x, u)$ (1.3) оказывается излишним.

Отметим еще, что если $v' = 0$ при $x \in [0, 1]$, т.е. $v(x) = \text{Const}$, то $u(x)$ не может иметь локальных минимумов в области значений $u \geq 0$. В самом деле, если минимум функции $u(x)$ в точке $\bar{x}$, то выберем по обе стороны от $\bar{x}$ точки a и b $(a < b)$ так, чтобы $u(a) = u(b)$. Проинтегрируем уравнение (1.1)

$$Lu = -f(x, u)$$

по x от a до b:

$$\frac{1}{Pe} D(x)\, u'(x) \Big|_a^b - v u(x) \Big|_a^b = -\int_a^b f(x, u)\, dx ,$$

или

$$\frac{1}{Pe} (D(b)\, u'(b) - D(a)\, u'(a)) = -\int_a^b f(x, u)\, dx . \tag{2.10}$$

В силу неотрицательности функции источника $f(x, u)$ справа величина не большая нуля. Поскольку $u'(a) \leq 0$ и $u'(b) \geq 0$, соотношение (2.10) может выполняться только при $u'(a) = u'(b) = 0$. В силу произвольности выбора пары точек a, b это приводит к равенству $u'(x) = 0, x \in [a, b]$, или к соотношению $u(x) = \text{Const}$. С другой стороны, раздвигая точки a, b мы можем продолжить этот процесс на весь интервал $[0, 1]$, причем $u(x)$ должна оставаться постоянной. Однако, это противоречит граничным условиям (1.2). Следовательно, локального минимума нет. В предположении непрерывности $u(x)$ и при отсутствии локальных минимумов, решение может иметь не более одного максимума в области $d_2 \leq u(x) \leq 1$.

Определение области значений может оказаться важным, например, при выборе начального приближения в итерационном процессе.

3. Для решения краевой задачи (1.1), (1.2) был использован метод квазилинеаризации [3]. Последовательное решение квазилинеаризованных уравнений является итерационным методом решения исходного уравнения. Квазилинеаризованное уравнение для i-того приближения $u^{(i)}$ и граничные условия имеют вид:

$$\begin{aligned}&\frac{1}{Pe}Du^{(i)''}+\left(\frac{1}{Pe}D'-v\right)u^{(i)'}-v'\,u^{(i)}+\\ &+(u^{(i)}-u^{(i-1)})f'_u(x,u^{(i-1)})+f(x,u^{(i-1)})=0\,,\\ &u^{(i)}(0)=d_1,\quad u^{(i)}(1)=d_2\,.\end{aligned}\tag{3.1}$$

Отметим, что для использования метода квазилинеаризации дополнительно требуется, чтобы, как это видно из (3.1), производная функции источника f'_u была непрерывна.

В общей теории линейных дифференциальных уравнений (см. например, [1]) доказывается, что для существования и единственности решения уравнения (3.1) при любых d_1 и d_2 необходимо и достаточно, чтобы однородное уравнение, соответствующее (3.1),

$$\frac{1}{Pe}Dw''+\left(\frac{1}{Pe}D'-v\right)w'-\left(v'-f'_u(x,u^{(i-1)})\right)w=0\tag{3.2}$$

с однородными граничными условиями

$$w(0)=w(1)=0\tag{3.3}$$

не имело других решений, кроме тривиального $w(x)=0$. Докажем выполнение этого условия.

Теорема 3. Уравнение (3.2) с граничными условиями (3.3) при выполнении условий (1.3), (1.5) имеет единственное решение $w(x)\equiv 0$.

Доказательство. Перепишем уравнение (3.2), используя (2.1), в виде:

$$Lw=-f'_u(x,u^{(i-1)})\,w\,.\tag{3.4}$$

Вследствие (1.3), $-f'_u(x,u^{(i-1)})\geq 0$. Допустим от противного, что в некотором интервале $w>0$. Тогда существуют точки a, b такие, что $w(a)=w(b)=0$ и $w(x)>0$, $x\in(a,b)$, и следовательно, $w(x)$ имеет максимум при $x\in[a,b]$. Однако, при этом справа в (3.4) величина не меньшая нуля, поэтому, на основании Леммы 1, в этом интервале может выполняться только равенство $w(x)=\text{Const}$, и следовательно $w(x)=0$, $x\in[a,b]$. Мы пришли к противоречию с допущением, что на некотором интервале $w>0$. Совершенно также, с помощью Леммы 2 доказывается, что w не может быть меньше нуля. Отсюда следует, что единственным решением уравнения (3.2) с граничными условиями (3.3) является $w(x)\equiv 0$.

Таким образом, решение уравнения (3.1) существует и единственно. Из этого следует также существование (но еще не сходимость) итерационного процесса.

4. Рассмотрим условия, при которых для $u^{(i)}$ можно получить оценки, сходные с полученными в пункте 2 (Теорема 2) для $u(x)$. Покажем ограниченность $u^{(i)}$ снизу.

Теорема 4. При соответствующем выборе начального приближения $u^{(0)}$ для всех решений последовательности краевых задач (3.1) выполняется неравенство:

(4.1) $$u^{(i)}(x) \geq 0, \quad i = 1, 2, \ldots .$$

Доказательство. Перепишем уравнение (3.1) в виде:

(4.2) $$Lu^{(i)} = -(u^{(i)} - u^{(i-1)}) f'_u(x, u^{(i-1)}) - f(x, u^{(i-1)}).$$

Предположим, что $u^{(i-1)} \geq 0$ и допустим от противного, что на некотором интервале $u^{(i)}(x) < 0$. На основании граничных условий должны существовать точки a, b, такие, что $u^{(i)}(a) = u^{(i)}(b) = 0$, $u^{(i)}(x) < 0$, $x \in (a, b)$. Тогда существует по крайней мере одна точка $\bar{x} \in [a, b]$, в которой $u^{(i)}$ имеет минимум. Так как $f(\bar{x}, u^{(i-1)}) \geq 0$, $f'_u(\bar{x}, u^{(i-1)}) \leq 0$ и $u^{(i)}(\bar{x}) < 0 \leq u^{(i-1)}(\bar{x})$, справа в (4.2) величина не большая нуля. Однако, по Лемме 2, единственным случаем мимимума может быть $u^{(i)}(x) = \text{Const}$, $x \in [a, b]$, и следовательно $u^{(i)}(x) = 0$. Полученное протироворечие с допущением $u^{(i)}(x) < < 0$ показывает, что если $u^{(i-1)} \geq 0$, то $u^{(i)}(x) \geq 0$.

Отметим, что ни здесь, ни в Теореме 3 при доказательстве не требовалось, чтобы $u^{(i-1)}$ было решением краевой задачи (3.1). Поэтому, для выполнения неравенства (4.1) для $i = 1, 2, \ldots$ достаточно выбрать в качестве начального приближения произвольную функцию, удовлетворяющую

(4.3) $$u^{(0)}(x) \geq 0 .$$

Рассмотрим теперь ограниченность $u^{(i)}$ сверху. Для доказательства нам понадобятся дополнительные предположения относительно свойств функции источника.

Теорема 5. Пусть наряду с (1.5) и (1.3) выполняется условие:

(4.4) $$f''_{uu}(x, u) \geq 0$$

в области определения $f(x, u)$. Тогда при соответствующем выборе начального приближения $u^{(0)}$ для всех решений $u^{(i)}$ последовательности краевых задач (3.1) выполняется неравенство:

(4.5) $$u^{(i)}(x) \leq 1 .$$

Доказательство. Пусть $u^{(i-1)} \leq 1$. Рассмотрим значение разложения функции $f(x, u)$ в окрестности $(x, u^{(i-1)})$ в ряд Тейлора при $u = 1$:

$$f(x,1)=0=f(x,u^{(i-1)})+(1-u^{(i-1)})f'_u(x,u^{(i-1)})+ \tag{4.6}$$
$$+\frac{1}{2}(1-u^{(i-1)})^2 f''_{uu}(x,\Theta),$$

где $u^{(i-1)}\leq\Theta\leq 1$. Подставляя это разложение в (4.2), получим:

$$Lu^{(i)}=(1-u^{(i)})f'_u(x,u^{(i-1)})+\frac{1}{2}(1-u^{(i-1)})^2 f''_{uu}(x,\Theta). \tag{4.7}$$

Предположим, что в некотором интервале $u^{(i)}>1$. На основании граничных условий должны существовать точки a, b такие, что $u^{(i)}(a)=u^{(i)}(b)=1$, $u^{(i)}(x)>1$, $x\in(a,b)$. Тогда, существует по крайней мере одна точка $\bar{x}\in[a,b]$, в которой достигается максимум. Поскольку справа в (4.7) величина не меньшая нуля, по Лемме 1 $u^{(i)}$ не может иметь иного максимума, кроме $u^{(i)}(x)=\mathrm{Const}$, и следовательно $u^{(i)}(x)=1$, $x\in[a,b]$. Мы пришли к противоречию с предположением $u^{(i)}(x)>1$, $x\in(a,b)$. Следовательно, если $u^{(i-1)}\leq 1$, то $u^{(i)}(x)\leq 1$.

При доказательстве этого утверждения также не требовалось, чтобы $u^{(i-1)}$ было решением уравнения (3.1). Поэтому для выполнения неравенства (4.5) для последовательности решений $u^{(i)}$, $i=1,2,\ldots$ достаточно выбрать в качестве начального приближения произвольную функцию, удовлетворяющую условию:

$$u^{(0)}(x)\leq 1. \tag{4.8}$$

5. В предыдущем пункте (Теоремы 4, 5) мы показали ограниченность функции $u^{(i)}$ снизу и сверху: $0\leq u^{(i)}(x)\leq 1$. Покажем теперь сходимость последовательности $u^{(i)}$, $i=1,2,\ldots$.

Теорема 6. Пусть для f''_{uu} выполняется условие (4.4). Тогда последовательность функций $u^{(i)}$, $i=1,2,\ldots$ — решений краевой задачи (3.1) при соответствующем выборе начального приближения сходится и предельная функция $\bar{u}$ является решением исходной квазилинейной краевой задачи.

Доказательство. Получим сначала одно важное соотношение между $u^{(i)}$ и $u^{(i+1)}$. Выпишем для них уравнения (3.1):

$$Lu^{(i)}=-(u^{(i)}-u^{(i-1)})f'_u(x,u^{(i-1)})-f(x,u^{(i-1)}), \tag{5.1}$$
$$Lu^{(i+1)}=-(u^{(i+1)}-u^{(i)})f'_u(x,u^{(i)})-f(x,u^{(i)}).$$

Вычтем первое уравнение из второго и обозначим $w=u^{(i+1)}-u^{(i)}$. Тогда:

$$Lw=-wf'_u(x,u^{(i)})-f(x,u^{(i)})+ \tag{5.2}$$
$$+(u^{(i)}-u^{(i-1)})f'_u(x,u^{(i-1)})+f(x,u^{(i-1)}),$$
$$w(0)=w(1)=0.$$

Разложим $f(x, u^{(i)})$ в ряд Тейлора в окрестности $(x, u^{(i-1)})$:

$$f(x, u^{(i)}) = f(x, u^{(i-1)}) + (u^{(i)} - u^{(i-1)}) f'_u(x, u^{(i-1)}) +$$

$$+\frac{1}{2}(u^{(i)} - u^{(i-1)})^2 f''_{uu}(x, \Theta), \tag{5.3}$$

где Θ между $u^{(i-1)}$ и $u^{(i)}$. Подставляя (5.3) в (5.2), получим:

$$Lw = -f'_u(x, u^{(i)})\, w - \frac{1}{2}(u^{(i)} - u^{(i-1)})^2 f''_{uu}(x, \Theta). \tag{5.4}$$

Так как w удовлетворяет однородным граничным условиям, то, если допустить, что на некотором интервале $w<0$, должны существовать точки a, b такие, что $w(a) = w(b) = 0$, $w(x)<0$, $x \in (a, b)$ и следовательно, должна существовать по крайней мере одна точка $\bar{x} \in [a, b]$, в которой w достигает минимума. Однако, поскольку в (5.4) при $w<0$ справа величина не положительная, то согласно Лемме 2 w не может иметь иного минимума, кроме $w(x) = 0$, $x \in [a, b]$. Поэтому $w(x) \geq 0$ всюду при $x \in [0, 1]$, откуда получаем:

$$u^{(i+1)}(x) \geq u^{(i)}(x), \quad i = 1, 2, \ldots. \tag{5.5}$$

По Теореме 5 все функции $u^{(i)}$ ограничены сверху. Таким образом, мы получили монотонно возрастающую (неубывающую) последовательность функций, ограниченную сверху. Следовательно, эта последовательность сходится к некоторой предельной функции $\bar{u}(x)$. Покажем, что эта функция является решением исходной квазилинейной краевой задачи.

Перепишем уравнение (3.1) в виде:

$$u^{(i)\prime\prime} + \left(\frac{D'}{D} - Pe\frac{v}{D}\right) u^{(i)\prime} - Pe\frac{v'}{D} u^{(i)} =$$

$$= -\frac{Pe}{D}\left[(u^{(i)} - u^{(i-1)}) f'_u(x, u^{(i-1)}) + f(x, u^{(i-1)})\right]. \tag{5.6}$$

Граничные условия остаются прежними:

$$u^{(i)}(0) = d_1, \quad u^{(i)}(1) = d_2. \tag{5.7}$$

Будем рассматривать (5.6), (5.7) как линейную неоднородную краевую задачу. Ее решение можно записать в виде [3]:

$$u^{(i)}(x) = d_1 \frac{u_1(x)\, u_2(1) - u_1(1)\, u_2(x)}{u_2(1)} +$$

$$+ (d_2 - w^{(i)}(1)) \frac{u_2(x)}{u_2(1)} + w^{(i)}(x), \tag{5.8}$$

где

$$w^{(i)}(x) =$$

$$(5.9)\quad = -\int_0^x G(x,t)\left[\left(u^{(i)}(t)-u^{(i-1)}(t)\right)f'_u\left(t,u^{(i-1)}(t)\right)+f\left(t,u^{(i-1)}(t)\right)\right]dt\,.$$

Функция $G(x, t)$ имеет вид:

$$G(x,t) = \frac{u_1(t)\,u_2(x)-u_1(x)\,u_2(t)}{W(t)}\,\frac{Pe}{D(t)}\,,$$

где вронскиан $W(t) = u_1(t)\,u_2'(t) - u_2(t)\,u_1'(t)$, и функции u_1 и u_2 — фундаментальная система решений однородного уравнения, соответствующего (5.6). Пусть они удовлетворяют следующим начальным условиям:

$$u_1(0) = 1,\quad u_1'(0) = 0;\quad u_2(0) = 0,\quad u_2'(0) = 1\,.$$

Эти функции, а следовательно и $G(x, t)$ не зависят от номера i.

Отметим, что $u_2(1)$ в (5.8) не может обращаться в нуль. Как известно (см. напр. [3]), для этого достаточно, чтобы однородное уравнение, соответствующее (5.6) с однородными граничными условиями имело единственное решение $u_2(x) = 0$. Так как $D(x) > 0$, то это однородное уравнение эквивалентно уравнению

$$(5.10)\qquad Lu_2(x) = 0,\quad x\in[0,1]\,.$$

Допустим, что $u_2(x) > 0$ в некотором интервале. Но тогда должна существовать точка, в которой $u_2(x)$ достигает максимума. Однако, по Лемме 1, при $u_2 > 0$ нет других максимумов, кроме $u_2(x) = \mathrm{Const}$, $x\in[0,1]$, откуда, вследствие однородности граничных условий $u_2(x) = 0$. Таким образом, $u_2(x)$ не может быть больше нуля. Точно также, по Лемме 2, $u_2(x)$ не может быть меньше нуля. Следовательно, $u_2(x) \equiv 0$ — единственное решение уравнения (5.10) с однородными граничными условиями, и поэтому (в силу $u_2'(0) = 1$) $u_2(1) \neq 0$. Легко видеть, что $u_2(x) > 0$ при $x > 0$.

Рассмотрим возможность перехода к пределу при $i \to \infty$ в интеграле $w^{(i)}(x)$ (5.9). Выше мы показали (Теоремы 4, 5), что $u^{(i)}$ ограничена: для всех i $0 \le u^{(i)}(x) \le 1$. Поэтому, разность

$$0 \le u^{(i)}(x) - u^{(i-1)}(x) \le 1\,.$$

Далее, функции f и f'_u — непрерывные и поэтому ограниченные в конечной области $[0,1]\times[0,1]$. Покажем теперь, что $G(x, t)$ также ограничено. В силу непрерывности и ограниченности u_1 и u_2, остается рассмотреть ограниченность $W^{-1}(t)$. Используем для этого результат Абеля [3]. Для нашего уравнения (5.6) вронскиан $W(t)$ можно записать:

$$W(t) = W(0)\exp\left[-\int_0^t\left(\frac{D'(s)}{D(s)} - Pe\,\frac{v(s)}{D(s)}\right)ds\right].$$

Так как $W(0)=1$ в силу выбранных начальных условий для u_1, u_2,

$$\frac{1}{W(t)} = \frac{D(t)}{D(0)} \exp\left[-Pe\int_0^t \frac{v(s)}{D(s)}\,ds\right],$$

откуда следует ограниченность $G(x, t)$ в области $[0, 1]\times[0, 1]$. Таким образом, подинтегральная функция в (5.9) ограничена. Отсюда, по теореме Лебега [6], под знаком интеграла можно переходить к пределу при $i\to\infty$.

В выражении для $u^{(i)}$ (5.8) справа от i зависят только функции $w^{(i)}$. Переходя к пределу и обозначая

$$\lim_{i\to\infty} u^{(i)}(x) = \bar{u}(x),$$

получим

$$\bar{u}(x)=d_1\frac{u_1(x)\,u_2(1)-u_1(1)\,u_2(x)}{u_2(1)}+(d_2-\bar{w}(1))\frac{u_2(x)}{u_2(1)}+\bar{w}(x), \tag{5.11}$$

где

$$\bar{w}(x) = -\int_0^x G(x,t)f(t,\bar{u}(t))\,dt.$$

Уравнение (5.11) эквивалентно исходной краевой квазилинейной задаче, и поэтому $\bar{u}(x)$ есть решение задачи (1.1), (1.2). В этом можно убедиться также непосредственной подстановкой (5.11) в (1.1).

Известна оценка для решений неоднородных уравнений через правую часть [1]. Для решения системы уравнений (при условии единственности)

$$\mathbf{x}'' = B(t)\mathbf{x}+F(t)\mathbf{x}'+\mathbf{h}(t), \quad t\in[0,p], \ \mathbf{x}(0) = \mathbf{x}(p) = 0,$$

где $B(t)$ и $F(t)$ — непрерывные матрицы и $\mathbf{h}(t)$ — непрерывный вектор, существует такое K, что

$$\|\mathbf{x}(t)\|\le K\int_0^p \|\mathbf{h}(s)\|\,ds. \tag{5.12}$$

Перепишем уравнение (5.4) для $w = u^{(i+1)}-u^{(i)}$ в виде:

$$w'' = -\left(\frac{D'}{D}-Pe\frac{v}{D}\right)w'+wPe\left[\frac{v'}{D}-f'_u(x, u^{(i)})\right]- \\ -\frac{Pe}{2}\left(\frac{f''_{uu}(x,\Theta)}{D}\right)(u^{(i)}-u^{(i-1)})^2, \tag{5.13}$$

где Θ между $u^{(i)}$ и $u^{(i-1)}$. Предполагая, что $f''_{uu}(x, \Theta)$ непрерывно по x при любом $\Theta(x)\in[0, 1]$, применим к (5.13) оценку (5.12):

$$w(x) \leq K \int_0^1 \frac{Pe}{2} \frac{f''_{uu}(x, \Theta)}{D(x)} (u^{(i)} - u^{(i-1)})^2 \, dx .$$

Отсюда следует квадратичная сходимость последовательности $u^{(i)}(x)$:

$$\max_x |u^{(i+1)}(x) - u^{(i)}(x)| \leq K_1 \max_x |u^{(i)}(x) - u^{(i-1)}(x)|^2 , \tag{5.14}$$

где

$$K_1 = \frac{Pe}{2} K \max_x \left| \frac{f''_{uu}(x, u(x))}{D(x)} \right| .$$

Таким образом, Теорема 6 доказана, причем получены не только достаточные условия сходимости последовательности, но и показано, что эта сходимость квадратичная. По сути дела эту теорему можно рассматривать как доказательство существования решения исходной квазилинейной краевой задачи. В последнее время такой прием: доказательство существования и сходимости решений приближенных уравнений и посредством этого доказательство существования решения исходного уравнения, успешно применяется и в ряде случаев приводит к существенным результатам.

6. Выбор начального приближения для итерационного процесса $u^{(0)}$ не является простым. Выше мы наложили на него некоторые ограничения: (4.3), (4.8). Однако известно, что скорость сходимости итерационного процесса и число необходимых приближений при заданной точности зависят от выбора начального приближения: чем ближе $u^{(0)}$ к решению $u(x)$ краевой задачи (1.1), (1.2), тем быстрее сходится процесс.

Нами были проведены численные расчеты с начальным приближением, выбранным, как было показано, достаточно близким к решению $u(x)$, а также с более простой, линейной функцией $u^{(0)}(x)$:

$$u^{(0)}(x) = d_1 + (d_2 - d_1)\, x , \tag{6.1}$$

удовлетворяющей (4.3), (4.8). Число необходимых итераций во втором случае было больше всего на одну, иногда на две итерации, чем в первом случае. Поэтому, нахождение более точного начального приближения, если это требует значительного количества машинного времени, по нашему мнению нецелесообразно, и можно пользоваться $u^{(0)}$ в виде (6.1).

7. При проведении исследований можно было бы упростить запись исходного уравнения. Однако, мы воспользовались уравнением в форме (1.1), где все величины имеют простой физический смысл. Представляется, что в этом случае яснее видна физическая сущность допущений о входящих в уравнение величинах (например, (1.3), (1.5)) и облегчается суждение о соответствии этих дупущений физической картине явления. Мы уже упоминали, что все сделанные предположения не противоречат имеющимся сведениям о реальном процессе. В частности, из экспериментальных данных известно, что функция источника для исследованных химических реакций второго рода хорошо описывается функцией [7]

$$f(x,u)=k(x)(1-u)(b(x)-u),\quad b(x)>1,\quad k(x)>0. \tag{7.1}$$

Для этой функции в области ее определения $[0,1]\times[0,1]$ выполняются все сделанные выше предположения (1.3), (4.4):

$$f(x,u)\geq 0,\quad f'_u(x,u)<0,\quad f''_{uu}(x,u)>0. \tag{7.2}$$

Следует подчеркнуть также, что доказанные выше теоремы показывают достаточные условия существования, единственности, сходимости и т.п., а не необходимые. В частности, в одном из численных расчетов функция $v(x)$ была выбрана в виде суммы постоянной и периодической функции, и ее производная принимала в области определения как положительные, так и отрицательные значения. Однако, итерационный процесс и в этом случае оказался сходящимся.

8. Как было сказано в начале работы, необходимость проведенного здесь исследования связана с тем, что достаточные условия теорем о существовании и единственности решения, сходимости итерационного процесса для нашей краевой задачи вообще говоря не выполняются. В этих теоремах рассматривается наиболее общий случай нелинейных дифференциальных уравнений

$$x''=F(t,x,x') \tag{8.1}$$

с граничными условиями $x(0)=d_1$, $x(T)=d_2$.

Можно, например, указать на достаточное условие существования решения нелинейной краевой задачи [2]: непрерывность и ограниченность функции $F(t, x, x')$ в области $[0, T]\times R\times R$. Очевидно, для линейной части Lu уравнения (1.1) ограниченность не имеет места. Далее, для единственности решения уравнения (8.1) достаточным условием является удовлетворение условиям Липшица для $F(t, x, x')$ относительно x и x' с коэффициентами Θ_0 и Θ_1 [1], причем эти коэффициенты должны быть настолько малыми, чтобы удовлетворить условию:

$$\frac{\Theta_0}{8}+\frac{\Theta_1}{2}\leq 1. \tag{8.2}$$

В случае, например, когда функция источника задана в виде (7.1), где k и b постоянные, а $v=\mathrm{Const}$, это приводит к неравенству:

$$\frac{1}{Pe}\geq\frac{1}{2}+\frac{k(b+1)}{8}. \tag{8.3}$$

Таким образом, достаточные условия теоремы о единственности решения накладывают строгие ограничения не только на k и b, но также на Pe: $Pe<2$.

Далее, при рассмотрении [3] условий сходимости решений краевых задач с квазилинеаризованными уравнениями к решению нелинейной краевой задачи, взятой в общем виде (8.1), достаточный критерий сходимости для (7.1) и $v=\mathrm{Const}$ имеет вид:

$$\frac{1}{Pe} \geq \frac{4+k(2b+1)}{8(1\mp d_2)}. \tag{8.4}$$

Если d_2 близко к 1, Ре должно быть очень мало, и при $d_2 = 1$ условие (8.4) не может быть выполнено.

Следует отметить, что в нашей работе ни в Теореме 1, ни в Теореме 6 никаких предположений относительно Ре не делалось. Условия (1.3), (4.4), как указывалось выше, для функции (7.1) выполняются.

Таким образом, теоремы для нелинейных краевых задач оказались бесполезными для данной краевой задачи, описывающей реальный физический процесс. В то же время доказательство, например, существования и единственности решения было необходимо, т.к. его отсутствие ставит под сомнение пригодность данной математической модели для описания имеющего место физического процесса.

Именно такого рода трудности привели к необходимости рассмотрения частного случая квазилинейной краевой задачи для получения менее строгих условий для существования и единственности решения и сходимости итерационного процесса.

В заключение считаем своим приятным долгом поблагодарить д-ра Ласло Шимона за весьма полезное обсуждение представленных здесь результатов.

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Ph. Hartman.* Ordinary Differential Equations. N.Y. – London – Sydney 1964.
[2] *R. E. Edwards,* Functional Analysis. N.Y. – Chicago – San Francisco – Toronto – London 1965.
[3] *R. E. Bellman, R. Kalaba.* Quasilinearization and Nonlinear Boundary – Value Problems. N.Y. 1965.
[4] *K. G. Denbigh, J. C. R. Turner,* Chemical Reaktor Theory. Cambridge University Press 1970.
[5] *E. F. Beckenbach, R. E. Bellman.* Inequalities. Berlin – Heidelberg – N.Y. 1965.
[6] *Szőkefalvi-Nagy Béla.* Valós függvények és függvénysorok. Budapest 1965.
[7] *Korcsmáros Iván.* Al_2O_3 tartalmú ásványok feltárásának kinetikája. Kohászok Lapja 1975. 12. sz.