VILNIAUS UNIVERSITETAS

MATEMATIKOS IR INFORMATIKOS FAKULTETAS
DIFERENCIALINIŲ LYGČIŲ IR SKAIČIAVIMO
MATEMATIKOS KATEDRA

Artiom Samofalov

Vienos paviršinės reakcijos matematinio modelio sprendinių aprioriniai įverčiai ir vienaties teorema

Bakalauro baigiamasis darbas

Leidžiu ginti. . . . . .

Darbo vadovas **Prof. dr. Algirdas Ambrazevičius**

Vilnius 2017

Turinys

1 Įvadas **2**

2 Matematinis modelis **2**

3 Aprioriniai įverčiai **6**

4 Klasikinio sprendinio vienatis **11**

5 Literatūra **14**

1 Įvadas

Diferencialinių lygčių teorijoje susietų parabolinių ir paprastųjų diferencialinių lygčių sistemos yra gerai išnagrinėtos (žr. [3,4,5]). Šiose sistemose parabolinių lygčių sprendiniai priklauso nuo laiko t ir kintamojo $x \in \Omega \subset \mathbb{R}^n$, tuo tarpu, kai paprastųjų diferencialinių lygčių sprendiniai priklauso priklauso nuo laiko t ir parametro $x \in \Omega$. Heterogeninės katalitinės reakcijos taip pat yra modeliuojamos susietomis parabolinių bei diferencialinių lygčių sistemomis. Tačiau dalis parabolinių bei paprastosios diferencialinės lygtys yra sprendžiamos ne visoje srityje, o šios srities paviršiaus dalyje. Atvejai, kai nepaisoma adsorbato difuzijos katalizatoriaus paviršiumi, o reagentas difunduoja link paviršiaus bei produkto desorbcija nuo paviršiaus yra momentinė arba lėta, nagrinėjami darbuose [1,2]. Šiuose darbuose gaunami sprendinių apriorinai įverčiai, įrodoma klasikinio sprendinio vienaties ir egzistavimo teoremos.

Šiame darbe nagrinėsime bimolekulinės cheminės reakcijos tarp anglies monoksido ir diazotooksido matematinį modelį, tuo atveju kai produktų desorbcija nuo katalizatoriaus paviršiaus yra lėta. Gausime šio modelio klasikinių sprendinių apriorinius įverčius. Įrodysime vienaties teoremą.

2 Matematinis modelis

Šiame darbe mes nagrinėsime reakciją tarp anglies monoksido ir diazotooksido $N_2O \to N_2 + CO_2$, kuri vyksta tokiais etapais:

$$A_1 + K \underset{\kappa_{11}}{\overset{\kappa_1}{\rightleftarrows}} A_1K, \quad A_2 + K \underset{\kappa_{22}}{\overset{\kappa_2}{\rightleftarrows}} A_2K, \quad A_2K \overset{\kappa_3^*}{\to} \widehat{N}_2 + OK,$$

$$COK + OK \overset{\kappa_{13}}{\to} \widehat{CO}_2 + 2K, \quad \widehat{N}_2 \overset{\kappa_4}{\to} B_1, \quad \widehat{CO}_2 \overset{\kappa_5}{\to} B_2.$$

Schema 1

čia: $A_1 = CO$, $A_2 = N_2O$ yra reagentai; K - katalizatorius; $A_1K = COK$, $A_2K = N_2OK$ yra reagentų A_1, A_2 adsorbatai; OK - tarpiniai produktas; $\widehat{N}_2$, $\widehat{CO}_2$ - reakcijos produktai prieš desorbciją; $B_1 = N_2, B_2 = CO_2$ - reakcijos produktai po desorbcijos nuo katalizatoriaus

paviršiaus; κ_i, κ_{ii}, $i = 1,2$ - adsorbcijos ir desorbcijos greičio konstantos; κ_{13}, κ_{22}^* - vienakrypties reakcijos greičio konstantos; κ_5, κ_5^* - produktų B_1 ir B_2 desorbcijos konstantos. Pirmi du reakcijos etapai šioje reakcijoje yra grįžtamieji, visi kiti - negrįžtamieji.

Tarkime reagentai A_1, A_2 ir reakcijos produktai B_1, B_2 užima tam tikrą sritį $\Omega \subset \mathbb{R}^n$, $n \geq 3$; $a_1 = a_1(x,t)$, $a_2 = a_2(x,t)$ ir $b_1 = b_1(x,t)$, $b_2 = b_2(x,t)$ yra jų koncentracijos taške $x \in \Omega$ laiko momentu t. Tegul $S := \partial\Omega \subset C^{1+\alpha}$, $\alpha \in (0,1)$ yra $n-1$ - osios dimensijos paviršius, ir tegu S_2 yra tokios pat dimensijos uždara paviršiaus S dalis, $S_1 = S \setminus S_2$. Tegu $\rho = \rho(\xi)$ yra adsorbcijos taškų koncentracija paviršiuje S taške ξ, $\rho \in C(S)$, $\rho(\xi) = 0$ kiekvienam $\xi \in S_1$; $\rho\theta_i = \rho(\xi)\theta_i(\xi,t)$ yra $A_iK, i = 1,2$ koncentracija taške $\xi \in S_2$ laiko momentu t; $\rho\theta_3 = \rho(\xi)\theta_3(\xi,t)$ yra tarpinio produkto OK koncentracija taške $\xi \in S_2$ taiko momentu t; $\rho\theta_4 = \rho(\xi)\theta_4(\xi,t)$ ir $\rho\theta_5 = \rho(\xi)\theta_5(\xi,t)$ yra nedesorbuotų produktų B_1, B_2 koncentracijos taške $\xi \in S_2$ laiko momentu t, $\rho(1-\theta)$ yra neužpildytų molekulėmis adsorbcijos taškų dalis paviršiuje S_2, $\theta = \sum\limits_{i=1}^{5} \theta_i$.

Pagal prielaidą produktų B_1, B_2 desorbcija yra lėta. Todėl funkcijoms $\theta_i = \theta_i(\xi,t), i = 1,2,...,5$ gauname Koši uždavinį paprastųjų diferencialinių lygčių sistemai:

$$\begin{cases} \theta_1' = \kappa_1 a_1(1-\theta) - \kappa_{11}\theta_1 - \kappa_{13}\rho\theta_1\theta_3, & \theta_1|_{t=0} = \theta_{10}, \\ \theta_2' = \kappa_2 a_2(1-\theta) - \kappa_{22}\theta_2 - \kappa_{22}^*\theta_2, & \theta_2|_{t=0} = \theta_{20}, \\ \theta_3' = \kappa_{22}^*\theta_2 - \kappa_{13}\rho\theta_1\theta_3, & \theta_3|_{t=0} = \theta_{30}, \\ \theta_4' = \kappa_{22}^*\theta_2 - \kappa_4\theta_4, & \theta_4|_{t=0} = \theta_{40}, \\ \theta_5' = \kappa_{13}\rho\theta_1\theta_3 - \kappa_5\theta_5, & \theta_5|_{t=0} = \theta_{50}. \end{cases} \tag{1}$$

Reagentų A_1, A_2 difuzija aprašoma parabolinių lygčių sistema:

$$\begin{cases} \partial a_i/\partial t - k_i\Delta a_i = 0, & \Omega \times (0,T), \\ k_i\frac{\partial a_i}{\partial \mathbf{n}} = 0, & S_1 \times (0,T), \\ k_i\frac{\partial a_i}{\partial \mathbf{n}} + \kappa_i\rho a_i(1-\theta) = \kappa_{ii}\rho\theta_i, & S_2 \times (0,T), \\ a_i|_{t=0} = a_{i0}, i = 1,2, & \overline{\Omega}. \end{cases} \tag{2}$$

Produktų B_1 ir B_2 difuzija užrašoma tokiomis lygtimis:

$$\begin{cases} \partial b_i/\partial t - \hat{k}_i\Delta b_i = 0, & \Omega \times (0,T), \\ k_i\frac{\partial b_i}{\partial \mathbf{n}} = 0, & S_1 \times (0,T), \\ k_i\frac{\partial b_i}{\partial \mathbf{n}} = \kappa_{3+i}\rho\theta_{3+i}, & S_2 \times (0,T), \\ b_i|_{t=0} = b_{i0}, i = 1,2, & \overline{\Omega}. \end{cases} \tag{3}$$

Čia: $\theta_i' = \partial\theta_i/\partial t$, $\theta_{i0} = \theta_{i0}(\xi), \xi \in S_2$, yra pradinės θ_i reikšmės, $i = 1, 2, ..., 5$;
Δ yra n - matis Laplaso operatorius; $\partial/\partial\mathbf{n}$ yra išvestinė išorės normalės kryptimi paviršiui S; $a_{i0} = a_{i0}(x)$ ir $b_{i0} = b_{i0}(x)$ yra pradinės A_i ir B_i koncentracijos taške $x \in \overline{\Omega}$; k_i ir $\widehat{k}_i$ yra reagento A_i ir produkto B_i difuzijos koeficientai, $i = 1, 2$ paviršiuje S. Visos konstantos κ_i, κ_{ii}, κ_{13}, κ_2, κ_{22}, κ_{22}^*, κ_4, κ_5, k_i, $\widehat{k}_i$ laikomos teigiamomis.

Modelis (1) - (3) turi šiuos tris masės tvermės dėsnius:

$$\int\limits_{\Omega} (a_1(x,s) + b_2(x,s))dx\Big|_{s=0}^{s=t} + \int\limits_{S_2} \rho(\xi)(\theta_1(\xi,s) + \theta_5(\xi,s))dS_\xi\Big|_{s=0}^{s=t} = 0, \tag{4}$$

$$\int\limits_{\Omega} (a_2(x,s) + b_1(x,s))dx\Big|_{s=0}^{s=t} + \int\limits_{S_2} \rho(\xi)(\theta_2(\xi,s) + \theta_4(\xi,s))dS_\xi\Big|_{s=0}^{s=t} = 0, \tag{5}$$

$$\int\limits_{\Omega} (a_1(x,s) + 2b_2(x,s) + a_2(x,s))dx\Big|_{s=0}^{s=t} + \int\limits_{S_2} \rho(\xi)(\theta_1(\xi,s) + \theta_2(\xi,s) + \tag{6}$$
$$+ \theta_3(\xi,s) + 2\theta_5(\xi,s))dS_\xi\Big|_{s=0}^{s=t} = 0.$$

Žemiau yra pateiktas (4) - (6) dėsnių gavimo būdas. Tarkime, (2) lygtyje $i = 1$. Suintegravę abi šios lygties puses cilindru $\Omega \times (0, t)$, gausime lygybę:

$$\int\limits_0^t \int\limits_{\Omega} \left(\frac{\partial a_1}{\partial t} - k_1\Delta a_1\right)dxd\tau = 0, \tag{7}$$

kurią, panaudojus Gryno formulę, perrašysime taip:

$$\int\limits_{\Omega} a_1 dx\Big|_{s=0}^{s=t} - k_1 \int\limits_0^t \int\limits_S \frac{\partial a_1}{\partial \mathbf{n}} dsd\tau = 0. \tag{8}$$

Paviršius $S = S_1 \cup S_2$. Todėl (8) formulę, panaudojus (2) kraštinę sąlygą, galime perrašyti taip:

$$\int\limits_{\Omega} a_1 dx\Big|_{s=0}^{s=t} - \int\limits_0^t \int\limits_{S_2} (\kappa_{11}\rho\theta_1 - \kappa_1\rho a_1(1-\theta))dsd\tau = 0. \tag{9}$$

Remiantis (1) sistemos pirmąja lygtimi $\kappa_{11}\theta_1 - \kappa_1 a_1(1-\theta) = -\kappa_{13}\rho\theta_1\theta_3 - \theta_1'$. Todėl:

$$\int\limits_{\Omega} a_1 dx\Big|_{s=0}^{s=t} + \int\limits_0^t \int\limits_{S_2} \rho(\kappa_{13}\rho\theta_1\theta_3 + \theta_1')dsd\tau = 0 \Rightarrow$$

$$\int\limits_{\Omega} a_1 dx\Big|_{s=0}^{s=t} + \int\limits_{S_2} \rho\theta_1 ds\Big|_{s=0}^{s=t} + \int\limits_0^t \int\limits_{S_2} \rho^2\kappa_{13}\theta_1\theta_3 dsd\tau = 0. \tag{10}$$

Analogiškai, iš (2) lygties kai i = 2, turėsime:

$$\int\limits_0^t \int\limits_{\Omega} \left(\frac{\partial a_2}{\partial t} - k_2\Delta a_2\right)dxd\tau = 0 \Rightarrow$$

$$\int\limits_{\Omega} a_2 dx\Big|_{s=0}^{s=t} - \int\limits_0^t \int\limits_{S} (\kappa_{22}\rho\theta_2 - \kappa_2\rho a_2(1-\theta))dsd\tau = 0. \tag{11}$$

Remiantis (1) sistemos atrąja lygtimi (10) formulę galima perrašyti taip:

$$\int\limits_{\Omega} a_2 dx\Big|_{s=0}^{s=t} + \int\limits_0^t \int\limits_{S_2} \rho(\kappa_{22}^*\theta_2 + \theta_2')dsd\tau = 0 \Rightarrow$$

$$\int\limits_{\Omega} a_2 dx\Big|_{s=0}^{s=t} + \int\limits_{S_2} \rho\theta_2 ds\Big|_{s=0}^{s=t} + \int\limits_0^t \int\limits_{S_2} \rho\kappa_{22}^*\theta_2 dsd\tau = 0. \tag{12}$$

Suintegravus (3) sistemos pirmąją lygtį cilindru $\Omega \times (0,t)$ ir atlikus analogiškus pertvarkymus, kai $i = 1, 2$ gausime:

$$\int\limits_{\Omega} b_1 dx\Big|_{s=0}^{s=t} + \int\limits_{S_2} \rho\theta_4 ds\Big|_{s=0}^{s=t} - \int\limits_0^t \int\limits_{S_2} \rho\kappa_{22}^*\theta_2 dsd\tau = 0, \tag{13}$$

$$\int\limits_{\Omega} b_2 dx\Big|_{s=0}^{s=t} + \int\limits_{S_2} \rho\theta_5 ds\Big|_{s=0}^{s=t} - \int\limits_0^t \int\limits_{S_2} \rho^2\kappa_{13}\theta_1\theta_3 dsd\tau = 0, \tag{14}$$

arba

$$\int\limits_{\Omega} b_2 dx\Big|_{s=0}^{s=t} + \int\limits_{S_2} \rho(\theta_3 + \theta_5) ds\Big|_{s=0}^{s=t} - \int\limits_0^t \int\limits_{S_2} \rho\kappa_{22}^*\theta_2 dsd\tau = 0. \tag{15}$$

Sudėjus (10) ir (14) lygybes gauname pirmąjį tvermės dėsnį.

Sudėjus (12) ir (13) gauname antrąjį tvermės dėsnį.

Sudėjus (10), (12), (14) ir (15) lygybes gauname trečiąjį tvermės dėsnį.

3 Aprioriniai įverčiai

Prielaida 3.1 *Funkcija ρ bei pradinės funkcijos a_{i0}, b_{i0}, $i = 1, 2$ ir θ_{i0}, $i = 1, 2, ..., 5$ tenkina tokias sąlygas:*

1. *Funkcijos θ_{i0}, $i = 1, 2, ..., 5$ yra tolydžios ir $\theta_{i0} \geq 0$ paviršiuje S_2.*
2. $\theta_0(\xi) = \sum_{i=1}^{5} \theta_{i0}(\xi) < 1$ *visiems* $\xi \in S_2$.
3. *Funkcijos a_{i0} ir b_{i0}, $i = 1, 2$ yra tolydžios ir neneigiamos uždarinyje $\overline{\Omega}$.*
4. $\rho \in C(S), \rho(\xi) \geq 0$ *visiems* $\xi \in S$
5. $\rho(\xi) = 0$ *visiems* $\xi \in S_1$.

Apibrėžimas 3.1 *Funkcijų $(\theta_1, \theta_2, \theta_3, \theta_4, \theta_5)$, (a_1, a_2) ir (b_1, b_2) rinkiniai sudaro (1) - (3) uždavinio klasikinį sprendinį, kai:*

1. $\theta_i \in C(S_2 \times [0, T]), \theta_i' \in C(S_2 \times (0, T))$,
2. *Išvestinės $\partial a_i / \partial \boldsymbol{n}$ ir $\partial b_i / \partial \boldsymbol{n}$ yra tolydžios paviršiuje $S \times [0, T]$*
3. $a_i, b_i \in C^{2,1}(\Omega \times [0, T]) \cap C(\overline{\Omega} \times [0, T]), i = 1, 2$
4. *Tenkina (1) - (3) lygčių sistemą.*

Lema 3.1 *Tegu $a_i, i = 1, 2$ yra tolydžios neneigiamos uždaroje srityje $S_2 \times [0, T]$ funkcijos; θ_{i0}, $i = 1, 2, ..., 5$ ir ρ tenkina 3.1 prielaidos sąlygas ir $\kappa_{22} \geq \kappa_{22}^*$. Tegu $(\theta_1, \theta_2, \theta_3, \theta_4, \theta_5)$ yra lygčių sistemos (2) sprendinys. Tuomet*

$$\theta_i(\xi, t) \geq 0, i = 1, 2, ..., 5$$

ir

$$\theta(\xi, t) = \sum_{i=1}^{5} \theta_i(\xi, t) \leq 1$$

visiems $\xi \in S_2$, $t \in [0, T]$.

Įrodymas. Tarkime,

$$\gamma = \{(\theta_1, \theta_2, \theta_3, \theta_4, \theta_5) \in \mathbb{R}^5 : \theta_i = \theta_i(\xi, t), i = 1, 2, ..., 5, t \in [0, T]\}$$

yra (1) sistemos trajektorija, prasidedanti taške $(\theta_{10}(\xi), \theta_{20}(\xi), \theta_{30}(\xi), \theta_{40}(\xi), \theta_{50}(\xi))$, $\xi \in S_2$. Įrodysime, kad trajektorija γ neišeina už srities D, ribojamos plokštumomis $\theta_i = 0, i = 1, 2, ...5$ ir $\theta = 1$, ribų. Jeigu trajektorija γ nepalieka srities D, tai akivaizdu, kad $\theta_i(\xi, t) \geq 0, i = 1, 2, ..., 5$ ir $\theta(\xi, t) = \sum\limits_{i=1}^{5} \theta_i(\xi, t) \leq 1$ visiems $\xi \in S_2, t \in [0, T]$.

Pirmas metodas. Tarkime priešingai, kad trajektorija išeina už srities D ribų. Tada ji kerta kurią nors vieną iš plokštumų $\theta_i = 0, i = 1, 2, ...5, \theta = 1$.

Iš pradžių tarkime, kad trajektorija γ kerta plokštumą $\theta_1 = 0$ taške (ξ, t). Tada $\theta_1(\xi, t) = 0, \theta_j(\xi, t) \geq 0, j = 2, 3, 4, 5$ bei $\theta(\xi, t) \leq 1$ ir $\theta_1'(\xi, t) < 0$. Tačiau, remiantis (1) sistemos pirma lygtimi šiame taške turėsime:

$$0 > \theta_1' = \kappa_1 a_1 (1 - \theta) - \kappa_{11}\theta_1 - \kappa_{13}\rho\theta_1\theta_3 \geq 0.$$

Gauta prieštarą parodo, kad trajektorija γ plokštumos $\theta_1 = 0$ nekerta.

Jeigu trajektorija γ kerta plokštumą $\theta_2 = 0$ taške (ξ, t), tai $\theta_2(\xi, t) = 0, \theta_j(\xi, t) \geq 0, j = 1, 3, 4, 5$ bei $\theta(\xi, t) \leq 1$ ir $\theta_2'(\xi, t) < 0$. Tačiau, remiantis (1) sistemos antra lygtimi šiame taške turėsime:

$$0 > \theta_2' = \kappa_2 a_2 (1 - \theta) - \kappa_{22}\theta_2 - \kappa_{22}^*\theta_2 \geq 0.$$

Gauta prieštarą parodo, kad trajektorija γ plokštumos $\theta_2 = 0$ nekerta.

Jeigu trajektorija γ kerta plokštumą $\theta_3 = 0$ taške (ξ, t), tai $\theta_3(\xi, t) = 0, \theta_j(\xi, t) \geq 0, j = 1, 2, 4, 5$ bei $\theta(\xi, t) \leq 1$ ir $\theta_3' < 0$. Tada (žr. (1) sistemos trečią lygtį):

$$0 > \theta_3' = \kappa_{22}^*\theta_2 - \kappa_{13}\rho\theta_1\theta_3 \geq 0.$$

Gauta prieštarą parodo, kad trajektorija γ plokštumos $\theta_3 = 0$ nekerta.

Tarkime, trajektorija γ kerta plokštumą $\theta_4 = 0$ taške (ξ, t). Tada $\theta_4(\xi, t) = 0, \theta_j(\xi, t) \geq 0, j = 1, 2, 3, 5$ bei $\theta(\xi, t) \leq 1$. Remiantis (1) sistemos ketvirta lygtimi šiame taške yra

teisingos nelygybės:

$$0 > \theta_4' = \kappa_{22}^* \theta_2 - \kappa_4 \theta_4 \geq 0.$$

Gauta prieštarą parodo, kad trajektorija γ plokštumos $\theta_4 = 0$ nekerta.

Jeigu trajektorija γ kerta plokštumą $\theta_5 = 0$ taške (ξ, t), tai $\theta_5(\xi, t_5) = 0, \theta_j(\xi, t_5) \geq 0, j = 1, 2, 3, 4$ bei $\theta(\xi, t_5) \leq 1$, $\theta_5' < 0$. Tačiau, remiantis (1) sistemos penkta lygtimi taške (ξ, t) turėsime:

$$0 > \theta_5' = \kappa_{13} \rho \theta_1 \theta_3 - \kappa_5 \theta_5 \geq 0.$$

Gauta prieštara parodo, kad trajektorija γ plokštumos $\theta_5 = 0$ nekerta.

Dabar įrodysime, kad trajektorija γ nekerta plokštumos $\theta = 1$. Tarkime priešingai, kad trajektorija γ palieka sritį D kirsdama plokštumą $\theta(\xi, t) = 1$ taške (ξ, t). Tuomet $\theta(\xi, t) = 1, \theta_i(\xi, t) \geq 0, i = 1, 2..., 5, \theta' > 0$.

Susumavus (1) lygčių sistemos visas lygtis panariui, gausime lygybę:

$$\theta' = -\kappa_{11}\theta_1 - \kappa_{22}\theta_2 + \kappa_{22}^* \theta_2 - \kappa_{13}\rho\theta_1\theta_3 - \kappa_4\theta_4 - \kappa_5\theta_5.$$

Pagal lemos sąlygą $\kappa_{22} \geq \kappa_{22}^*$, todėl taške (ξ, t) yra teisingos nelygybės:

$$0 < \theta' = -\kappa_{11}\theta_1 - \kappa_{22}\theta_2 + \kappa_{22}^* \theta_2 - \kappa_{13}\rho\theta_1\theta_3 - \kappa_4\theta_4 - \kappa_5\theta_5 \leq 0.$$

Gauta prieštarą parodo, kad trajektorija γ plokštumos $\theta = 1$ nekerta.

Jeigu trajektorija γ kerta dvi (arba daugiau) plokštumas $\theta_i = 0$ ir $\theta_j = 0$ jų susikirtimo taške (ξ, t), $i, j = 1, 2, ..., 5$, $i \neq j$, tai $\theta_i(\xi, t) = 0$ ir $\theta_j(\xi, t) = 0$, o $\theta_k(\xi, t) \geq 0$, $k \neq i, j; i \neq j$ ir $k, i, j = 1, 2, ..., 5$, $\theta(\xi, t) \leq 1$. Be to, bent viena iš išvestinių $\theta_i'(\xi, t) < 0$ arba $\theta_j'(\xi, t) < 0$. Bet tai prieštarauja i-jai arba j-jai lygčiai. Vadinasi, trajektorija γ nekerta plokšumų $\theta_i = 0$ ir $\theta_j = 0$ per jų susikirtimo tašką. Lema įrodyta.

Antras metodas. Suvesime (1) lygčių sistemą į integralinių lygčių sistemą.
Pertvarkę (1) sistemos pirmąją lygtį, turime:

$$\theta_1' + (\kappa_{11} + \kappa_{13}\rho\theta_3)\theta_1 = \kappa_1 a_1 (1 - \theta).$$

Abi šios lygties puses padauginę iš $e^{\int_0^t(\kappa_{11}+\kappa_{13}\rho\theta_3)ds}$, gausime lygtį, kurią perrašysime taip:

$$\left(\theta_1 e^{\int_0^t(\kappa_{11}+\kappa_{13})\rho\theta_3 ds}\right)' = \kappa_1 a_1(1-\theta)e^{\int_0^t(\kappa_{11}+\kappa_{13}\rho\theta_3)ds}.$$

Suintegravę laiko atžvilgiu, gausime:

$$\theta_1 e^{\int_0^t(\kappa_{11}+\kappa_{13}\rho\theta_3)d\tau} = \theta_{10} + \int_0^t(\kappa_1 a_1(1-\theta)e^{\int_0^\tau(\kappa_{11}+\kappa_{13}\rho\theta_3)ds})d\tau.$$

Analogiškai, iš (1) sistemos antros lygties gausime:

$$\theta_2' + (\kappa_{22}+\kappa_{22}^*)\theta_2 = \kappa_2 a_2(1-\theta) \Rightarrow$$

$$(\theta_2 e^{(\kappa_{22}+\kappa_{22}^*)t})' = \kappa_2 a_2(1-\theta)e^{(\kappa_{22}+\kappa_{22}^*)t} \Rightarrow$$

$$\theta_2 e^{(\kappa_{22}+\kappa_{22}^*)t} = \theta_{20} + \int_0^t(\kappa_2 a_2(1-\theta)e^{(\kappa_{22}+\kappa_{22}^*)\tau})d\tau.$$

Atlikus analogiškus veiksmus (1) sistemos likusioms lygtims, gausime:

$$\theta_3' + (\kappa_{22}^*\rho\theta_3)\theta_1 = \kappa_{22}^*\theta_2 \;\Rightarrow\; \theta_3 e^{\int_0^t(\kappa_{13}\rho\theta_3)ds} = \theta_{30} + \int_0^t \kappa_{22}^*\theta_2 e^{\int_0^\tau \kappa_{13}\rho\theta_3 ds}d\tau,$$

$$\theta_4' + \kappa_4\theta_4 = \kappa_{22}^*\theta_2 \;\Rightarrow\; \theta_4 e^{\kappa_4 t} = \theta_{40} + \int_0^t \kappa_{22}^*\theta_2 e^{\kappa_4\tau}d\tau,$$

$$\theta_5' + \kappa_5\theta_5 = \kappa_{13}\rho\theta_1\theta_3 \;\Rightarrow\; \theta_5 e^{\kappa_5 t} = \theta_{50} + \int_0^t \kappa_{13}\rho\theta_1\theta_3 e^{\kappa_5\tau}d\tau.$$

Taigi, gavome tokią integralinių lygčių sistemą:

$$\begin{cases} \theta_1 e^{\int_0^t(\kappa_{11}+\kappa_{13}\rho\theta_3)d\tau} = \theta_{10} + \int_0^t(\kappa_1 a_1(1-\theta)e^{\int_0^\tau(\kappa_{11}+\kappa_{13}\rho\theta_3)ds})d\tau, \\ \theta_2 e^{(\kappa_{22}+\kappa_{22}^*)t} = \theta_{20} + \int_0^t(\kappa_2 a_2(1-\theta)e^{(\kappa_{22}+\kappa_{22}^*)\tau})d\tau, \\ \theta_3 e^{\int_0^t(\kappa_{13}\rho\theta_3)ds} = \theta_{30} + \int_0^t \kappa_{22}^*\theta_2 e^{\int_0^\tau \kappa_{13}\rho\theta_3 ds}d\tau, \\ \theta_4 e^{\kappa_4 t} = \theta_{40} + \int_0^t \kappa_{22}^*\theta_2 e^{\kappa_4\tau}d\tau, \\ \theta_5 e^{\kappa_5 t} = \theta_{50} + \int_0^t \kappa_{13}\rho\theta_1\theta_3 e^{\kappa_5\tau}d\tau. \end{cases} \tag{16}$$

Įrodykime, kad trajektorija γ nepalieka srities D. Tarkime priešingai, kad trajektorija γ išeina už srities D ribų. Tada ji kerta kurią nors veiną iš plokštumų $\theta_i = 0, i = 1, 2, ...5$, $\theta = 1$ laiko momentu t^*. Tuomet $\theta_i(\xi, t^*) = 0, \theta_j(\xi, t^*) > 0$ kai $j \neq i$, ir $\theta(\xi, t^*) < 1$. Tuomet egzistuoja toks $\epsilon > 0$, kad $\theta_i(\xi, t) < 0$ kur $t \in (t^*, t^* + \epsilon]$ ir $\theta_j(\xi, t^*) \geq 0, j \neq i$, o $\theta(\xi, t) \leq 1$, kai $t \in [t^*, t + \epsilon]$. Bet šiems t iš (15) sistemos i - osios lygties gausime nelygybę $\theta_i(\xi, t) \geq 0$. Ši prieštara parodo, kad γ nepalieka srities D kertant plokštumą $\theta_i = 0$.

Panašiai galima parodyti, kad trajektorija γ nepalieka srities D per kelių plokštumų $\theta_i = 0, i = 1, 2, ..., 5$ susikirtimo taškus. Pavyzdziui, jei trajektorija γ palieka sritį D per plokštumų $\theta_1 = 0$ ir $\theta_2 = 0$ susikirtimo tašką laiko momentu t^*, tuomet egzistuoja $\epsilon > 0$ toks, kad $\theta_1(\xi, t) < 0$ arba $\theta_2(\xi, t) < 0$ ir $\theta_j(\epsilon, t) > 0$, $j = 1, 2$ kur $t \in (t^*, t^* + \epsilon]$, $\theta(\xi, t) \leq 1$, kur $t \in [t^*, t^* + \epsilon]$. Tačiau iš lygčių sistemos (16) pirmųjų dviejų lygčių matome, kad šiems t gausime $\theta_1(\xi, t) \geq 0$ ir $\theta_2(\xi, t) \geq 0$. Ši prieštara parodo, kad γ nepalieka srities D per plokštumų $\theta_1 = 0$ ir $\theta_2 = 0$ susikirtimo taškus. Taigi, gauname, kad $\theta_i(\xi, t) \geq 0$, $i = 1, 2, ..., 5$ kur $\xi \in S_2$, $t \in [0, T]$.

Tarkime, kad trajektorija γ palieka sritį D per plokštumą $\theta = 1$. Tuomet egzistuoja toks laiko momentas $t^* > 0$, kad $\theta_i(\xi, t) \geq 0$, $i = 1, 2, ..., 5$, $\theta(\xi, t) \leq 1$, kur $t \in [0, t^*]$. Susumavus visas lygčių sistemos (16) lygtis, gausime:

$$\theta' - 1 = (\kappa_1 a_1 + \kappa_2 a_2)(1 - \theta) - \kappa_{11}\theta_1 - \kappa_{22}\theta_2 + \kappa_{22}^*\theta_2 - \kappa_4\theta_4 - \kappa_5\theta_5 - \kappa_{13}\rho\theta_1\theta_3.$$

Padauginus abi šios lygties puses iš $e^{\int_0^t(\kappa_1 a1 + \kappa_2 a_2)ds}$ ir suintegravus atžvilgiu t gausime lygtį:

$$(1 - \theta)e^{\int_0^t(\kappa_1 a1 + \kappa_2 a_2)ds} = 1 - \theta_0 + \int_0^t (\kappa_{11}\theta_1 + (\kappa_{22} - \kappa_{22}^*)\theta_2 + \kappa_4\theta_4 + \kappa_5\theta_5 + \kappa_{13}\rho\theta_1\theta_3)e^{\int_0^\tau(\kappa_1 a_1 + \kappa_2 a_2)ds}d\tau.$$

Pagal 3.1 prielaidą, $\theta_0(\xi) < 1$ ir $\kappa_{22} \geq \kappa_{22}^*$. Tuomet kai $t = t^*$ šios lygties kairė pusė yra lygi 0, o dešinė - teigiama. Gauta prieštara parodo, kad γ nepalieka srities D per plokštumą $\theta = 1$. Taigi, $\theta(\xi, t) \leq 1$ kai $\xi \in S_2$, $t \in [0, T]$. Lemos įrodymas baigtas.

Įrodant (2) sistemos sprendinių apriorinius įverčius, naudosime pozityvumo lemą.

Lema 3.2 (Pozityvumo) *Tarkime, kad funkcija $a(x, t) \in C(\overline{\Omega} \times (0, T)) \cap C^{2,1}(\Omega \times (0, T))$ yra tokia, kad:*

$$\begin{cases} a_t - La + ca \geq 0, & (x, t) \in \Omega \times (0, T), \\ \alpha\dfrac{\partial a}{\partial n} + \beta a \geq 0, & (x, t) \in S \times (0, T), \\ a(x, 0) \geq 0, & (x, t) \in \overline{\Omega}. \end{cases} \tag{17}$$

Čia $\alpha \geq 0$, $\beta \geq 0$, $\alpha + \beta > 0$, $c = c(x, t)$ aprėžta funkcija srityje $\Omega \times (0, T)$, $a_t = \partial a/\partial t$, $La \equiv \sum_{i,j=1}^{n} k_{i,j}(x, t)\dfrac{\partial^2 a}{\partial x_i \partial x_j} + \sum_{j=i}^{n} l_j(x, t)\dfrac{\partial a}{\partial x_j}$. Tuomet $a(x, t) \geq 0$, kai $x \in \overline{\Omega}, t \in [0, T]$.

Lema 3.3 *Tegu $\theta_i = \theta_i(\xi, t), i = 1, 2, ..., 5$ yra tolydžios neneigiamos funkcijos uždaroje srityje $S_2 \times [T, 0]$ tokios, kad $\theta(x, t) = \sum_{i=1}^{5} \theta_i(\xi, t) \leq 1$ visiems $\xi \in S_2$, $t \in [0, T]$. Tegu $a_{i0}, i = 1, 2$ ir ρ tenkina 3.1 prielaidos sąlygas ir $a_i, i = 1, 2$ yra klasikinis (3) uždavinio sprendinys. Tuomet visiems $x \in \overline{\Omega}, t \in [0, T]$ yra teisingos nelygybes:*

$$0 \leq a_i(x, t) \leq \beta_i, i = 1, 2$$

kur konstantos β_i nepriklauso nuo funkcijų $\theta_i, i = 1, 2, ..., 5$.

Įrodymas. Remiantis pozityvumo lema, funkcijos $a_i, i = 1, 2$ uždaroje srityje $\overline{\Omega} \times [0, T]$ negali turėti neigiamo minimumo. Todėl $a_i(x, t) \geq 0$ visiems $x \in \overline{\Omega}$ ir $t \in [0, T]$. Tarkime, $\hat{a}_i$, $i = 1, 2$ yra pagalbinio uždavinio:

$$\begin{cases} \partial \hat{a}_i / \partial t - k_i \Delta \hat{a}_i = 0, & \Omega \times (0, T), \\ \partial \hat{a}_i / \partial \mathbf{n} = 0, & S_1 \times (0, T), \\ \partial \hat{a}_i / \partial \mathbf{n} = \kappa_{ii} \rho, & S_2 \times (0, T), \\ \hat{a}_i|_{t=0} = a_{i0}, i = 1, 2, & \overline{\Omega}, \end{cases} \tag{18}$$

sprendinys, $\max\limits_{x \in \overline{\Omega}, t \in [0,T]} \hat{a}_i(x, t) = \beta_i$. Tegu $w_i = \hat{a}_i - a_i, i = 1, 2$. Tada

$$\begin{cases} \partial w_i / \partial t - k_i \Delta w_i = 0, & \Omega \times (0, T), \\ \partial w_i / \partial \mathbf{n} = 0, & S_1 \times (0, T), \\ \partial w_i / \partial \mathbf{n} = \kappa_{ii} \rho (1 - \theta_i) + \kappa_i \rho a_i (1 - \theta) \geq 0, & S_2 \times (0, T), \\ w_i|_{t=0} = 0, i = 1, 2, & \overline{\Omega}, \end{cases}$$

Tada pagal pozityvumo lemą funkcija $w_i, i = 1, 2$ uždaroje srityje $\overline{\Omega} \times [0, T]$ negali turėti neigiamo minimumo, t.y. $w_i(x, t) \geq 0 \Rightarrow a_i(x, t) \leq \hat{a}_i(x, t) \leq \beta_i$ visiems $x \in \overline{\Omega}$ ir $t \in [0, T]$. □

4 Klasikinio sprendinio vienatis

Lema 4.1 (Gronuolo) *Tegu C - teigiama konstanta ir $f(x) \geq 0, \lambda(x) \geq 0$ yra tolydžios intervale (a, b) funkcijos, tenkinančios nelygybę:*

$$f(x) \leq \lambda(x) + C \left| \int_{x_0}^{x} f(x) ds \right| \qquad x_0, x \in (a, b).$$

Tuomet visiems $x \in (a,b)$:

$$f(x) \le \lambda(x) + C\left|\int\limits_{x_0}^{x} e^{C|x-s|}\lambda(s)ds\right| \qquad x_0, x \in (a,b).$$

Teorema 4.1 ***(Vienaties)*** *Uždavinys (1), (2) negali turėti dviejų skirtingų sprendinių.*

Įrodymas. Tegu $\hat{\theta}_i, i = 1,2...,5, \hat{a}_i, i = 1,2$ ir $\tilde{\theta}_i, i = 1,2...,5, \tilde{a}_i, i = 1,2$ yra uždavinio (1), (2) klasikiniai sprendiniai ir $\theta_i = \hat{\theta}_i - \tilde{\theta}_i$, $i = 1,2...,5$, $a_i = \hat{a}_i - \tilde{a}_i$, $i = 1,2$, $\theta = \sum\limits_{i=1}^{5} \theta_i$. Tuomet:

$$\begin{cases} \theta_1' = \kappa_1 a_1(1-\hat{\theta}) - \kappa_1\tilde{a}_1\theta - \kappa_{11}\theta_1 - \kappa_{13}\rho(\theta_1\hat{\theta}_3 + \tilde{\theta}_1\theta_3), t \in (0,T), \\ \theta_2' = \kappa_2 a_2(1-\hat{\theta}) - \kappa_2\tilde{a}_2\theta - (\kappa_{22} + \kappa_{22}^*)\theta_2, t \in (0,T), \\ \theta_3' = \kappa_{22}^*\theta_2 - \kappa_{13}\rho(\theta_1\hat{\theta}_3 + \tilde{\theta}_1\theta_3), t \in (0,T), \\ \theta_4' = \kappa_{22}^*\theta_2 - \kappa_4\theta_4, t \in (0,T), \\ \theta_5' = \kappa_{13}\rho(\theta_1\hat{\theta}_3 + \tilde{\theta}_1\theta_3) - \kappa_5\theta_5, t \in (0,T). \end{cases} \tag{19}$$

$\theta_i|_{t=0} = 0, i = 1,2,...,5$, $\xi \in S_2$. Suintegravę šias lygtis atžvilgiu t, gausime integralinių lygčių sistemą:

$$\begin{cases} \theta_1 = \int_0^t (\kappa_1 a_1(1-\hat{\theta}) - \kappa_1\tilde{a}_1\theta - \kappa_{11}\theta_1 - \kappa_{13}\rho(\theta_1\hat{\theta}_3 + \tilde{\theta}_1\theta_3))ds, t \in (0,T), \\ \theta_2 = \int_0^t (\kappa_2 a_2(1-\hat{\theta}) - \kappa_2\tilde{a}_2\theta - (\kappa_{22} + \kappa_{22}^*)\theta_2)ds, t \in (0,T), \\ \theta_3 = \int_0^t (\kappa_{22}^*\theta_2 - \kappa_{13}\rho(\theta_1\hat{\theta}_3 + \tilde{\theta}_1\theta_3))ds, t \in (0,T), \\ \theta_4 = \int_0^t (\kappa_{22}^*\theta_2 - \kappa_4\theta_4)ds, t \in (0,T), \\ \theta_5 = \int_0^t (\kappa_{13}\rho(\theta_1\hat{\theta}_3 + \tilde{\theta}_1\theta_3) - \kappa_5\theta_5)ds, t \in (0,T). \end{cases} \tag{20}$$

Tegul $|\theta| = \sum\limits_{i=1}^{5} |\theta_i|$, tuomet:

$$|\theta| \le \int_0^t (\kappa_1|a_1| + \kappa_2|a_2|)ds + C\int_0^t |\theta|ds. \tag{21}$$

Čia $C = \sum\limits_{i=1}^{2} \kappa_i\tilde{m}_i + \max\{\kappa_{11} + 3\kappa_{13}\overline{\rho}, \kappa_{22} + 3\kappa_{22}^*, \kappa_4, \kappa_5\}$, $\overline{\rho} = \max\rho(\xi)$, $\tilde{m}_i = \max|\tilde{a}_i(\xi,t)|$, $i = 1,2$. Naudodamiesi Gronuolo lema, gausime:

$$|\theta(\xi,t)| \le e^{Ct}\int\limits_0^t (\kappa_1|a_1(\xi,s)| + \kappa_2|a_2(\xi,s)|)ds. \tag{22}$$

Funkcijos a_i, $i = 1, 2$ yra sistemos (2) sprendinys. Padauginę šią sistemą iš a_i ir suintegravę cilindru $\Omega \times (0, T)$, gausime:

$$\frac{1}{2}\int\limits_{\Omega} a_i^2 dx + \int\limits_0^\tau \int\limits_{\Omega} \kappa_i |\nabla a_i|^2 dxdt = \int\limits_0^\tau \int\limits_{S_2} (\kappa_i \rho(\tilde{a}_i \theta + (\hat{\theta} - 1)a_i) + \kappa_{ii}\rho\theta_i) a_i dSdt \leq \tag{23}$$

$$C_1 \int\limits_0^\tau \int\limits_{S_2} (|a_1(\xi, t)| + |a_2(\xi, t)|)|\theta(\xi, t)| dSdt, \quad C_1 = \overline{\rho} \max\{\kappa_i \tilde{m}_i + \kappa_{ii}\}.$$

Panaudojus nelygybę (21), turime:

$$\int\limits_0^\tau \int\limits_{S_2} |a_1(\xi, t)||\theta(\xi, t)| dSdt \leq e^{C\tau} \int\limits_{S_2} \int\limits_0^\tau |a_1(\xi, t)| dt \int\limits_0^\tau (\kappa_1 |a_1(\xi, t)| + \kappa_2 |a_2(\xi, t)|) dtdS \tag{24}$$

$$\leq \tau e^{C\tau} (\kappa_1 \int\limits_0^\tau \int\limits_{S_2} a_1^2(\xi, t) dSdt + \frac{\kappa_2}{2} \int\limits_0^\tau \int\limits_{S_2} (a_1^2(\xi, t) + a_2^2(\xi, t)) dSdt),$$

$$\int\limits_0^\tau \int\limits_{S_2} |a_2(\xi, t)||\theta(\xi, t)| dSdt \leq e^{C\tau} \int\limits_{S_2} \int\limits_0^\tau |a_2(\xi, t)| dt \int\limits_0^\tau (\kappa_1 |a_1(\xi, t)| + \kappa_2 |a_2(\xi, t)|) dtdS \tag{25}$$

$$\leq \tau e^{C\tau} (\kappa_2 \int\limits_0^\tau \int\limits_{S_2} a_2^2(\xi, t) dSdt + \frac{\kappa_1}{2} \int\limits_0^\tau \int\limits_{S_2} (a_1^2(\xi, t) + a_2^2(\xi, t)) dSdt).$$

Tada remiantis (23), (24) nelygybėmis (22) nelygybę perrašykime taip:

$$\frac{1}{2}\int\limits_{\Omega} \sum_{i=1}^{2} a_i^2 dx + \int\limits_0^\tau \int\limits_{\Omega} \sum_{i=1}^{2} k_i |\nabla a_i|^2 dxdt \leq C_2 \int\limits_0^\tau \int\limits_{S_2} \sum_{i=1}^{2} a_1^2 dSdt \tag{26}$$

Kiekvienam $\epsilon > 0$ yra teisinga nelygybė (žr. [7]):

$$\int\limits_S a^2 dx \leq \epsilon \int\limits_{\Omega} |\nabla a|^2 dx + C_\epsilon \int\limits_{\Omega} a^2 dx, \tag{27}$$

kur konstanta C_ϵ nepriklauso nuo funkcijos a ir $C_\epsilon \to \infty$, kai $\epsilon \to 0$. Panaudojus (25) ir (26) gauname nelygybę:

$$\int\limits_{\Omega} \sum_{i=1}^{2} a_i^2 dx + \int\limits_0^\tau \int\limits_{\Omega} \sum_{i=1}^{2} \kappa_i |\nabla a_i|^2 dxdt \leq C_2 \int\limits_0^\tau \int\limits_{\Omega} \sum_{i=1}^{2} a_i^2 dxdt. \tag{28}$$

Tegu

$$\Phi(\tau) = \int_0^\tau \int_\Omega \sum_{i=1}^{2} a_i^2 dxdt.$$

Tada yra teisinga nelygybė:

$$\Phi'(\tau) \leq C_2 \Phi(\tau). \tag{29}$$

Padauginę abi šios nelygybės puses iš $e^{C_2\tau}$ gausime:

$$\Phi'(\tau)e^{C_2\tau} \leq C_2\Phi(\tau)e^{C_2\tau} \quad \Rightarrow \quad (\Phi(\tau)e^{C_2\tau})' \leq 0 \quad \Rightarrow \quad \Phi(\tau) \leq 0.$$

Taigi

$$\int_0^\tau \int_\Omega \sum_{i=1}^{2} a_i^2 dxdt \leq 0.$$

Tai reiškia, kad $a_i = 0, i = 1, 2$. Iš (21) gauname, kad $\theta_i = 0, i = 1, 2, ..., 5$. Įrodymas baigtas.

5 Literatūra

[1] Ambrazevičius A.: Solvability of a coupled system of parabolic and ordinary differential equations, Cent. Eur. J. Math. 8(3) 537 - 547 p. (2010)

[2] Ambrazevičius A.: Nonlinear Analysis: Modelling and control, Vol 15, No. 4., 405-421 p. (2010)

[3] Pao C.V.: Nonlinear Parabolic and Elliptic Equations. Springer, New York (1992)

[4] Pao C.V., Ruan W.H.: Positive solutions of quazilinear parabolic systems with Dirichlet boundary condition. J. Differ. Equ. 248, 1175 - 1211 p. (2010)

[5] Pao C.V.: Quasilinear parabolic and elliptic euqations with nonlinear boundary conditions. Nonlinear Anal. 66, 639 - 662 (2006)

[6] Bibikov J.N.: Bendrasis paprastųjų diferencialinių lygčių kursas, LGU, 232 p. (1981)

[7] Fadeev D.K., Vulih B.Z., Uraltseva N.N.: Rinktiniai analizės ir algebros skyriai, LGU, 180 p. (1981)