УДК 532+533
DOI: 10.17277/vestnik.2015.01.pp.071-077

РЕАКЦИОННО-ДИФФУЗИОННЫЕ УРАВНЕНИЯ С ЗАДЕРЖКОЙ ПО ВРЕМЕНИ*

А. Д. Полянин[1,2], А. И. Журов[1], А. В. Вязьмин[3]

ФГБУН «Институт проблем механики им. А. Ю. Ишлинского РАН», г. Москва; (1); кафедра «Прикладная математика», ФГБОУ ВПО «Московский государственный технический университет им. Н. Э. Баумана», г. Москва (2); кафедра «Химия металлов», ФГБОУ ВПО «Московский государственный машиностроительный университет (МАМИ)», г. Москва (3); av1958@list.ru

Ключевые слова: время задержки; дифференциально-разностные уравнения; диффузия; релаксация; точные решения; химическая реакция.

Аннотация: Рассмотрены нестационарные дифференциально-разностные уравнения диффузии при наличии химической реакции с задержкой. Физический смысл таких уравнений заключается в том, что химические превращения в локально-неравновесных средах обладают инерционными свойствами: система откликается на воздействие не в тот же момент времени t, как в классическом локально-равновесном случае, а на время релаксации τ позже. Различными методами построено несколько точных решений уравнений такого класса для одномерного случая.

Введение

В основе современных методов расчета энергетических и массообменных аппаратов лежат представления о стационарном характере протекающих в них процессов, используются усредненные или эффективные значения коэффициентов переноса и предполагается линейная связь между соответствующими потоками и градиентами температур и концентраций (законы Фика и Фурье) [1, 2]. За последние десятилетия накоплен большой эмпирический материал, свидетельствующий о существенной ограниченности таких методов расчета. Так, для большинства процессов переноса характерна нестационарность вследствие возникновения переходных явлений за счет внешних или внутренних воздействий [3 – 5].

Несмотря на технологическую предпочтительность нестационарных режимов тепло- и массопереноса их неконтролируемое развитие может привести к серьезным техническим и экологическим катастрофам. Чтобы в полной мере использовать преимущества нестационарных процессов тепло- и массопереноса в энергетике, химической технологии, металлургии, добыче нефти и газа, экологии, химии, биологии и медицине и избежать их негативного воздействия на техногенную среду обитания человека, необходимо развитие теоретических основ управления этими процессами. Этого можно добиться только на основе изучения физики явлений переноса в сложных, существенно изменяющихся во времени средах при наличии внутренних и внешних нелинейных воздействий.

---

* По материалам доклада на конференции ММТТ-27 (см. Вестник ТГТУ, т. 20, № 4).

Рассмотрение нестационарных процессов тепло- и массопереноса показало, что общепринятые уравнения типа теплопроводности являются уравнениями параболического типа и обладают физически парадоксальным свойством – бесконечной скоростью распространения возмущений. Подобная ситуация не наблюдается на практике. Сказанное свидетельствует об ограниченной области применимости классических уравнений типа теплопроводности [6]. Учет скорости распространения тепла и вещества в среде переноса в нестационарных процессах приводит к уравнению теплопроводности гиперболического типа, которое дает конечную скорость распространения возмущений и в настоящее время широко используется для решения тепловых задач (например [7, 8]. В связи с практической и теоретической важностью этой проблемы предложены другие, более адекватные физической природе распространения тепла и вещества дифференциально-разностные модели тепло- и массопереноса с релаксацией [9, 10]. Указанная дифференциально-разностная модель обобщена на случай реакционно-диффузионных уравнений и их систем, для которых различными методами получен целый ряд точных решений, в том числе и для начально-краевых задач [11 – 14].

Реакционно-диффузионные уравнения с задержкой и их точные решения

Рассмотрим типовые примеры нелинейных уравнений и систем с запаздыванием, содержащих реакционные члены. Во-первых, это реакционно-диффузионные уравнения с запаздыванием вида

$$u_t = ku_{xx} + F(u, w), \tag{1}$$

где $u = u(x,t)$, $w = u(x,t-\tau)$, τ – время запаздывания.

Во-вторых, дифференциально-разностные уравнения теплопроводности (диффузии) с конечным временем релаксации вида

$$\mathrm{v}_t = [f(u)u_x]_x + g(\mathrm{v}), \qquad \mathrm{v} = u(x,t+\tau), \tag{2}$$

которые являются следствием модели Каттанео–Вернотте $\mathbf{q}|_{t+\tau} = -\lambda\nabla T$ для теплового потока.

Области приложений уравнений (1), (2): химическая механика, теория массо- и теплопереноса, гидродинамика, теория фильтрации, теплофизика, биология, биохимия, биофизика, биомеханика, химия, физическая химия, медицина, экология, экономика, теория искусственных нейронных сетей, теория управления и др. Физический смысл запаздывания: в моделях массо- и теплопереноса, гидродинамики и биологии запаздывание обычно связано с конечной скоростью распространения возмущений или инерционными свойствами системы, которая реагирует на воздействие не мгновенно, а на время τ позже. Заметим, что может быть несколько различных времен запаздывания $\tau_1, ..., \tau_n$. Запаздывание может зависеть от времени $\tau = \tau(t)$.

Термин точные решения нелинейных дифференциальных уравнений (систем уравнений) в частных производных с запаздыванием применяется, когда решение выражается: через элементарные функции и неопределенные и определенные интегралы; через решения обыкновенных дифференциальных уравнений или обыкновенных дифференциальных уравнений с запаздыванием (или систем таких уравнений). Допустимы также комбинации указанных решений. Данное определение обобщает определение точных решений, которое часто используется для нелинейных уравнений в частных производных без запаздывания.

Установлено, что уравнения вида (1) допускают очевидные решения типа бегущей волны $u = u(z)$, где $z = ax + bt$. Эти решения изучались в целом ряде работ (численный анализ, теоремы существования и единственности). Также исследовалась устойчивость (в линейном приближении) стационарных решений и решений типа бегущей волны уравнения (1). Его полный групповой анализ выполнен в [15]. Найдены четыре уравнения вида (1), допускающие точные решения; два из этих уравнений имеют вырожденные решения. Второе из двух невырожденных решений является частным случаем первого.

Метод функциональных связей

Уравнения вида (1) и (2) имеют решения с обобщенным разделением переменных. Найдем точные решения вида

$$u = \sum_{n=1}^{N} \Phi_n(x)\Psi_n(t), \tag{3}$$

где функции $\Phi_n(x)$ и $\Psi_n(t)$ подлежат определению.

Рассмотрим класс уравнений с запаздыванием, подробно описанный в [14]:

$$u_t = ku_{xx} + uf(z) + wg(z) + h(z), \quad w = u(x, t-\tau), \quad z = z(u, w), \tag{4}$$

где $f(z)$, $g(z)$, $h(z)$ – произвольные функции; а $z = z(u, w)$ – функция, удовлетворяющая некоторым условиям.

Для (4) необходимо найти решения с обобщенным разделением переменных (3), удовлетворяющие одной из двух функциональных связей [14]:

$$\begin{aligned} z(u,w) &= p(x), \qquad w = u(x, t-\tau); \\ z(u,w) &= q(t), \qquad w = u(x, t-\tau), \end{aligned} \tag{5}$$

которые представляют собой разностные уравнения по t, где x играет роль свободного параметра. Функция $z = z(u, w)$ является аргументом произвольных функций, входящих в уравнение (4). Функции $p(x)$ и $q(t)$ зависят от x и t неявно (выражаются через функции $\Phi_n(x)$ и $\Psi_n(t)$). Решение (частное) одного из разностных уравнений (5) с учетом (3) определяет допустимый вид точного решения, окончательный вид которого находится из исходного реакционно-диффузионного уравнения (4).

Точное решение линейного диффузионно-реакционного уравнения с задержкой

Для примера рассмотрим реакционно-диффузионное уравнение вида

$$u_t = ku_{xx} + bu + f(u - w), \tag{6}$$

которое является частным случаем уравнения (4) при $z = u - w$. Функциональная связь 2-го рода (5) имеет вид

$$u - w = q(t), \qquad w = u(x, t-\tau). \tag{7}$$

Разностному уравнению (7) можно удовлетворить, если положить

$$u = \varphi(x) + \psi(t), \tag{8}$$

что дает $q(t) = \psi(t) - \psi(t-\tau)$. Подставив (8) в (6) и разделив переменные, получим уравнения для $\varphi(x)$ и $\psi(t)$:

$$k\varphi'' + b\varphi = C, \quad \psi'(t) = b\psi(t) + C + f(\psi(t) - \psi(t-\tau)).$$

Рассмотрим снова уравнение (6), однако, примем для него функциональную связь 1-го рода (5), которая имеет вид

$$u - w = p(x), \qquad w = u(x, t-\tau). \tag{9}$$

Разностному уравнению (9) можно, например, удовлетворить, взяв решение с обобщенным разделением переменных

$$u = t\varphi(x) + \psi(x), \tag{10}$$

которое дает $p(x) = \tau\varphi(x)$. Подставив (10) в (6), получим обыкновенные дифференциальные уравнения для $\varphi(x)$ и $\psi(x)$:

$$k\varphi''_{xx} + b\varphi = 0, \quad k\psi''_{xx} + b\psi + f\left(\tau\varphi\right) - \varphi = 0.$$

Рассмотрим в качестве примера линейное уравнение теплопроводности с источником вида

$$\mathrm{v}_t = k_1 \mathrm{v}_{xx} + b\mathrm{v}.$$

Данное уравнение имеет τ-периодические решения, пригодные для анализа краевых задач

$$\mathrm{v}(x,t) = \sum_{n=0}^{N} A_n \exp(-\lambda_n x)\cos(\beta_n t - \gamma_n x + B_n) +$$

$$+ \sum_{n=1}^{M} C_n \exp(\lambda_n x)\cos(\beta_n t + \gamma_n x + D_n),$$

$$\beta_n = \frac{2\pi n}{\tau}, \quad \lambda_n = \left(\frac{\sqrt{b^2 + \beta_n^2} - b}{2k_1}\right)^{1/2}, \quad \gamma_n = \left(\frac{\sqrt{b^2 + \beta_n^2} + b}{2k_1}\right)^{1/2},$$

где A_n, B_n, C_n, D_n – постоянные; $N = 0, 1, 2, ...$; $M = 1, 2, 3, ...$; $\mathrm{v}(x,t) = \mathrm{v}(x, t-\tau)$.

Неустойчивость систем реакционно-диффузионных уравнений

Рассмотрим класс нелинейных реакционно-диффузионных систем уравнений с запаздыванием

$$\begin{aligned} u_t &= k_1 u_{xx} + bu + F(u - a\overline{u}, w, \overline{w}); \\ w_t &= k_2 w_{xx} + G(u - a\overline{u}, w, \overline{w}), \end{aligned} \tag{11}$$

где $u = u(x,t)$, $w = w(x,t)$, $\overline{u} = u(x, t-\tau)$, $\overline{w} = w(x, t-\tau)$; $F(...)$, $G(...)$ – произвольные функции трех аргументов; τ – время запаздывания (τ > 0, F – невырождена по первому аргументу).

Пусть

$$u_0 = u_0(x,t), \quad w_0 = w_0(x,t) \tag{12}$$

произвольное решение рассматриваемой системы (11). Прямой проверкой можно убедиться, что система (11) при $a > 0$ имеет также решение

$$u = u_0(x,t) + e^{ct}\mathrm{v}(x,t), \;\; w = w_0(x,t), \;\; c = \frac{1}{\tau}\ln a, \tag{13}$$

где $\mathrm{v} = \mathrm{v}(x, t)$ – любое τ-периодическое решение линейного уравнения теплопроводности с источником

$$\mathrm{v}_t = k_1 \mathrm{v}_{xx} + (b-c)\mathrm{v}, \quad \mathrm{v}(x,t) = \mathrm{v}(x, t-\tau). \tag{14}$$

Стационарное пространственно-периодическое решение задачи (14):

$$\mathrm{v} = \varepsilon \sin(\sigma x + \mu), \quad \sigma = \sqrt{(b-c)/k_1}, \quad b \ge c, \tag{15}$$

где ε, μ – произвольные постоянные. Из анализа формул (13) и (15) следует, что любое решение системы (11) будет неустойчивым при выполнении условий

$$a > 1, \quad b > 0, \quad \tau \ge \tau_0, \quad \tau_0 = (\ln a)/b. \tag{16}$$

Физический смысл условий (16): в области параметров $a > 1$, $b > 0$ – неустойчивость возникает за счет запаздывания, которое должно быть достаточно большим $\tau \ge \tau_0$. Вид кинетических функций F и G не влияет на условия неустойчивости (16) реакционно-диффузионной системы (11) (то есть имеет место глобальная неустойчивость). Полученный результат является точным и не использует линеаризации и других приближений.

Точное решение системы (11), являющееся следствием формулы (13) и уравнения (14):

$$\begin{gathered} u = u_0(z) + \mathrm{e}^{ct}[A\sin(\sigma x) + B\cos(\sigma x)], \quad w = w_0(z), \\ z = \alpha x + \beta t, \quad c = (\ln a)/\tau, \quad \sigma = \sqrt{(b-c)/k_1}, \end{gathered} \tag{17}$$

где A, B, α, β – произвольные постоянные, а функции $u_0(z)$ и $w_0(z)$ описываются соответствующей нелинейной системой обыкновенных дифференциальных уравнений с запаздыванием. При $a = 1$, что соответствует $c = 0$, данное решение можно трактовать как нелинейную суперпозицию бегущей и стоячей волн.

Задачи с начальными данными ($-\infty < x < \infty$):

$$u = u_i(x,t), \;\; w = w_i(x,t) \;\; \text{при} \;\; 0 \le t \le \tau. \tag{18}$$

При выполнении условий (16) решение системы (11) с начальными данными (18) является неустойчивым.

Начально-краевые задачи $(0 \le x \le h)$. Система (11) с начальными данными (18) и граничными условиями первого рода:

$$\begin{aligned} u(0,t) &= \varphi_1(t), \quad w(0,t) = \psi_1(t), \\ u(h,t) &= \varphi_2(t), \quad w(h,t) = \psi_2(t), \end{aligned} \tag{19}$$

где $h = \pi/\sigma$. При условиях (16) решение задачи (11), (18), (19) является неустойчивым.

Список литературы

1. Плановский, А. Н. Процессы и аппараты химической и нефтехимической технологии / А. Н. Плановский, П. И. Николаев. – М. : Химия. 1987. – 496 с.

2. Кутателадзе, С. С. Основы теории теплообмена / С. С. Кутателадзе. – М. : Атомиздат. 1979. – 416 с.

3. Hydrodynamics, Mass and Heat Transfer in Chemical Engineering / A. D. Polyanin [et al.]. – London ; N.Y. : Taylor & Francis, 2002. – 387 p.

4. Alekseenko, S. V. Wave Flow of Liquid Films / S. V. Alekseenko, B. G. Pokusaev, V. E. Nakoryakov. – New York : Beggel House, Inc., 1994. – 313 p.

5. Pavlenko, A. N. Setting of Nonstationary Boundary Conditions in the Front with Changes of Boiling Modes / A. N. Pavlenko, I. P. Starodubtseva // J. Heat Transfer Research. – 2007. – Vol. 38, Is. 7. – P. 613-619.

6. Карслоу, Г. Теплопроводность твердых тел / Г. Карслоу, Д. Егер. – М. : Наука. 1964. – 488 с.

7. Jou, D. Extended Irreversible Thermodynamics / D. Jou, J. Casas-Väzquez, G. Lebon. – 2nd ed. – Berlin: Springer, 1996. – 201 p.

8. Tzou, D. Y. Macro- to Microscale Heat Transfer / D. Y. Tzou. – Washington : Taylor & Francis, 1997. – 304 p.

9. Полянин, А. Д. Дифференциально-разностные модели и уравнения теплопроводности и диффузии с конечным временем релаксации / А. Д. Полянин, А. В. Вязьмин // Теор. основы хим. технологии. – 2013. – Т. 47, № 3. – С. 271 – 278.

10. Полянин, А. Д. Уравнения теплопроводности и диффузии с конечным временем релаксации. Постановки задач и некоторые решения / А. Д. Полянин,

А. В. Вязьмин // Изв. ВУЗов. Химия и хим. технол. – 2013. – Т. 56, № 9. – С. 102 – 108.

11. Polyanin, A. D. Exact Solutions of Linear and Nonlinear Differential-Difference Heat and Diffusion Equations with Finite Relaxation Time / A. D. Polyanin, A. I. Zhurov // Int. J. Non-Linear Mech. – 2013. – Vol. 54. – P. 115 – 126.

12. Polyanin, A.D. New Generalized and Functional Separable Solutions to Nonlinear Delay Reaction-Diffusion Equations / A. D. Polyanin, A. I. Zhurov // Int. J. Non-Linear Mech. – 2014. – Vol. 59. – P. 16 – 22.

13. Polyanin, A. D. Exact Separable Solutions of Delay Reaction-Diffusion Equations and Other Nonlinear Partial Functional-Differential Equations / A. D. Polyanin, A. I. Zhurov // Comm. Nonlinear Sci. Num. Simulation. – 2014. – Vol. 19, No. 3. – P. 409 – 416.

14. Polyanin, A. D. Functional Constraints Method for Constructing Exact Solutions to Delay Reaction-Diffusion Equations and More Complex Nonlinear Equations / A. D. Polyanin, A. I. Zhurov // Comm. Nonlinear Sci. Num. Simulation. – 2014. – Vol. 19, No. 3. – P. 417 – 430.

15. Meleshko, S. V. On the Complete Group Classification of the Reaction-Diffusion Equation with a Delay / S. V. Meleshko, S. Moyo // J. Math. Anal. Appl. – 2008. – Vol. 338. – P. 448 – 466.

Time-Delayed Reaction-Diffusion Equations

A. D. Polyanin[1,2], A. I. Zhurov[1], A. V. Vyazmin[3]

The Institute for Problems in Mechanics of the Russian Academy of Sciences, Moscow (1); Department "Applied Mathematics", Bauman Moscow State Technical University (2); Department "Chemistry of Metals", Moscow State University of Mechanical Engineering (MAMI) (3), Moscow; av1958@list.ru

Keywords: chemical reaction; differential-difference equations; diffusion; exact solutions; relaxation; time of delay.

Abstract: Non-stationary differential-difference diffusion equations with delayed chemical reactions are considered. The physical essence of such equations is that the chemical transformation in media with local non-equilibrium has inertial properties: the system reacts to the action not at the same time point t as in the classical local equilibrium case, but by the relaxation time τ later. Several exact solutions to the equations of such class for one-dimensional case are constructed.

References

1. Planovskii A.N., Nikolaev P.I. *Protsessy I apparaty khimicheskoi i neftekhimicheskoi tekhnologii* (Processes and Apparatuses in Chemical and Petrochemcal Technology), Moscow: Khimiya, 1987, 496 p.

2. Kutateladze S.S. *Osnovy teorii teploobmena* (Fundamentals of Heat Transfer Theory), Moscow: Atomizdat, 1979, 416 p.

3. Polyanin A.D., Kutepov A.M., Vyazmin A.V., Kazenin D.A. *Hydrodynamics, Mass and Heat Transfer in Chemical Engineering*, London and N.Y.: Taylor & Francis, 2002, 387 p.

4. Alekseenko S.V., Pokusaev B.G., Nakoryakov V.E. Wave *Flow of Liquid Films*, New York: Beggel House, Inc., 1994, 313 p.

5. Pavlenko A.N., Starodubtseva I.P. *J. Heat Transfer Research*, 2007, vol. 38, is. 7, pp. 613-619.

6. Carslaw H.S., Jaeger J.C. *Conduction of Heat in Solids*, Oxford: Oxford Univ. Press, 1959, 488 p.
7. Jou D., Casas-Väzquez J., Lebon G. *Extended Irreversible Thermodynamics*, 2nd ed., Berlin: Springer, 1996, 201 p.
8. Tzou D.Y. *Macro- to Microscale Heat Transfer*, Washington: Taylor & Francis, 1997, 304 p.
9. Polyanin A.D., Vyazmin A.V. *Theoretical Foundation of Chemical Engineering*, 2013, vol. 47, no. 3, pp. 217-224.
10. Polyanin A.D., Vyazmin A.V. *Chemistry and Chemical Technology Research-Engineering Journal*, 2013, vol. 56 (9), pp. 102-108.
11. Polyanin A.D., Zhurov A.I. *Int. J. Non-Linear Mech*., 2013, vol. 54, pp. 115-126.
12. Polyanin A.D., Zhurov A.I. *Int. J. Non-Linear Mech*., 2014, vol. 59, pp. 16-22.
13. Polyanin A.D., Zhurov A.I. *Comm. Nonlinear Sci. Num. Simulation*, 2014, vol. 19, no. 3, pp. 409–416.
14. Polyanin A.D., Zhurov A.I. *Comm. Nonlinear Sci. Num. Simulation*, 2014, vol. 19, no. 3, pp. 417–430.
15. Meleshko S.V., Moyo S. *J. Math. Anal. Appl*., 2008, vol. 338, pp. 448-466.

Reaktiondiffusionsgleichungen mit der Verzögerung nach der Zeit

Zusammenfassung: Es sind die nichtstationären Differentialdifferenzgleichungen der Diffusion bei dem Vorhandensein der chemischen Reaktion mit der Verzögerung betrachtet. Der physikalischen Sinn solcher Gleichungen besteht darin, dass die chemischen Umwandlungen in den lokalnichtgleichwiegenden Umgebungen über die Trägheitseigenschaften verfügt: das System ruft auf die Einwirkung nicht zum selben Moment der Zeit t, wie in dem klassischen lokalgleichgewichten Fall, sondern für die Zeit der Relaxation τ später zurück. Von den verschiedenen Methoden sind einigen genauen Lösungen der Gleichungen solcher Klasse für den eindimensionalen Fall aufgebaut.

Équations de reaction et de diffusion avec le retard de temps

Résumé: Sont examinées les équations différentielles de différenciation non stationnaires de diffusion lors de la présence de la réaction chimique de retard. Par de différentes méthodes sont construites quelques quantités de solutions exactes des équations d’une telle classe pour pour un cas unidimensionnel.

Авторы: ***Полянин Андрей Дмитриевич*** – доктор физико-математических наук, профессор, главный научный сотрудник ФГБУН «Институт проблем механики им. А. Ю. Ишлинского РАН», г. Москва, профессор кафедры «Прикладная математика», ФГБОУ ВПО «Московский государственный технический университет им. Н. Э. Баумана», г. Москва; ***Журов Алексей Иванович*** – кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник, ФГБУН «Институт проблем механики им. А. Ю. Ишлинского РАН», г. Москва; ***Вязьмин Андрей Валентинович*** – доктор физико-математических наук, профессор кафедры «Химия металлов», ФГБОУ ВПО «Московский государственный машиностроительный университет (МАМИ)», г. Москва.

Рецензент: ***Гатапова Наталья Цибиковна*** – доктор технических наук, профессор, заведующая кафедрой «Технологические процессы, аппараты и техносферная безопасность» , ФГБОУ ВПО «ТГТУ».