

# НЕЛИНЕЙНОЕ УРАВНЕНИЕ ДИФФУЗИИ С ОПЕРАТОРОМ ЛИЗЕГАНГА НА ОТРЕЗКЕ

Б. А. Марков

*Южно-Уральский государственный университет, 454080, Челябинск*

УДК 517.928

В настоящей работе рассматривается нелинейное уравнение «реакция-диффузия» с т.н. оператором Лизеганга, моделирующем химические реакции, в правой части на конечном отрезке. Решение задачи строится как разложение по собственным функциям смешанной задачи Штурма — Лиувилля для второй пространственной производной на отрезке. Решение может быть построено как решение бесконечной системы дифференциальных уравнений, а движение границы определится из отдельного соотношения.

**Ключевые слова:** нелинейное уравнение диффузии, решение с разрывом производной, задача Флорина на отрезке, бесконечная система дифференциальных уравнений.

## Введение

В коллоидной химии широко распространено явление под названием «кольца Лизеганга» [1], открытое Лизегангом в 1897-ом году. Для описания колец Лизеганга школа [2] предложила ряд методов, однако в коллоидной химии из-за обилия химических веществ, превращающихся друг в друга (десятки тысяч химических реакций), их весьма затруднительно применить. В силу этого необходимо искать иные методы, позволяющие решать задачу, или же каким-то образом обосновать применение методов [2] в коллоидной химии.

С нашей точки зрения удобно пойти по первому пути: будем применять иные математические методы, отличные от методов школы [2]. Для этой цели мы воспользуемся следующим предположением. Пусть всё коллоидное вещество может быть разделено на собственно мицеллы геля и межмицеллярную жидкость. Межмицеллярную жидкость мы рассматривать не будем, полагая, что мицеллы просто берут из неё в нужном количестве все необходимые вещества или, наоборот, выбрасывают избыточные вещества в межмицеллярную жидкость. При этом веществ оказывается столько, сколько нужно и они всегда расположены там, где это требуется.

Само же поведение коллоида подчиним так называемому оператору Лизеганга, который обозначим как  $L[u]$ . Мы будем считать, что оператор Лизеганга внутренне присущ мицеллам геля. Обоснование нашего утверждения следует из большого количества экспериментальных данных. Также отметим, что такое предположение высказывал в 1950-ые годы Б. Дельмон, однако он не сформулировал краевой задачи [8].

Далее, для описания поведения мицелл коллоида воспользуемся обычным уравнением диффузии, к которому добавим оператор Лизеганга (уравнение «реакция-диффузия», где химические реакции моделирует оператор Лизеганга). И будем считать, что тем самым поведение мицелл в коллоиде задано полностью.

В настоящей работе рассматривается вариант решения уравнения нелинейной диффузии на отрезке, что, с точки зрения химических процессов, является более физико-химическим, чем аналогичная задача на полу-прямой, так как подобные процессы обычно и происходят в ограниченной области. Для решения уравнения воспользуемся обычным способом — замена переменной с последующим разложением по решениям смешанной задачи Штурма — Лиувилля второй пространственной производной на отрезке, границы которого неподвижны.

## 1 Оператор Лизеганга

Для того, чтобы читателю не было надобности разыскивать предыдущие работы, кратко рассмотрим оператор Лизеганга и задачи, к которым он приводит. Для этого рассмотрим уравнение «реакция-диффузия»

с оператором Лизеганга в правой части

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D \operatorname{div}(\operatorname{grad} u) + L[u], \quad (1)$$

где  $\vec{r}$  — радиус-вектор,  $D$  — коэффициент диффузии, зависящий, вообще говоря, от времени, координат и решения уравнения  $u(\vec{r}, t)$ , который мы для простоты примем равным 1,  $u \equiv u(\vec{r}, t)$  — искомая функция, по физико-химическому смыслу — концентрация коллоидного вещества,  $\operatorname{div}(\operatorname{grad} u) \equiv \Delta u$  — оператор Лапласа, заданный в пространстве  $R^3$ .

Задачу (1) будем рассматривать на отрезке  $x \in [0; 1]$ , диффузия постоянна и её коэффициент  $D = 1$ . С учётом этих предположений оператор Лапласа  $\Delta$  для этого отрезка запишем просто как вторую производную по координате,  $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2}$ . Дальше в данной работе слова «оператор Лапласа» будут пониматься в значении «вторая производная по координате», а сама задача (1) примет вид

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + L[u], \quad (2)$$

Оператор Лизеганга  $L[u]$  определим следующим образом.

**Определение.** Пусть  $u_{\max}$  и  $u_{\min}$  — два фиксированных числа. Оператором Лизеганга  $L[u]$  назовём оператор, который функции  $u(x, t)$  ставит в соответствие функцию  $g(x, t) = L[u(x, t)]$ . Область определения оператора  $L[\cdot]$  — непрерывные функции  $u(x, t)$ ,  $x \in R^1$ ,  $t \geq 0$  такие, что  $u_{\min} \leq u(x, t) \leq u_{\max}$ .

1.  $g(x, t) = +\alpha u(x, t)$ ,  $\alpha > 0$  либо если функция  $u(x, \tau) < u_{\max} \quad \forall \tau < t$ , либо если  $\exists \bar{\tau} < t$ , такое что  $u(x, \bar{\tau}) = u_{\min}$  и  $u_{\min} < u(x, t) < u_{\max} \quad \forall \tau : \bar{\tau} < \tau < t$ ;
2.  $g(x, t) = -\alpha u(x, t)$ ,  $\alpha > 0$  если  $\exists \bar{\tau} < t$ , такое что  $u(x, \bar{\tau}) = u_{\max}$  и  $u_{\min} < u(x, \tau) < u_{\max} \quad \forall \tau : \bar{\tau} < \tau < t$

( $\alpha$  невелико, обычно не более 0.1).

Под решением начальной задачи для уравнения (2) будем понимать функцию  $u(x, t)$  из указанного класса, которая равна заданной функции  $\phi(x)$  при  $t = 0$ , если выполнены дополнительные условия:

- 1) существует конечное число непрерывных кривых  $s_k = \{(x, t) : x = \sigma_k(t), 0 \leq c_k \leq t \leq d_k\}$ , при этом разные кривые могут иметь общие точки только на своих концах при  $t = c_k$  или  $t = d_k$ ;
- 2) функция  $u(x, t)$  непрерывна всюду при  $0 \leq t \leq T$  и удовлетворяет уравнению (1) всюду при  $0 \leq t \leq T$  вне кривых  $s_k$ ;
- 3) существуют односторонние производные  $\frac{\partial u}{\partial x}$  на кривых  $s_k$  и значения оператора  $L[u(x, t)]$  имеют разные знаки по разные стороны от кривой  $s_k$  при  $c_k < t < d_k$ .

Функцию  $u(x, t)$  в областях, расположенных по разные стороны от кривой  $s_k$ , будем называть разными фазами исследуемого вещества.

В [3] с помощью асимптотических рядов исследовано поведение решения. Заметим, что производная  $\frac{\partial u}{\partial x}$  на кривой  $s_k$  будет разрывна.

Таким образом, мы можем рассматривать задачу (2) как совокупность задач, каждая из которых представляет собой частный случай классической задачи Флорина на конечном отрезке, и существование такого решения (т.е. совокупности решений набора задач) следует, например, из работы [5]. Из условий, наложенных на начальную функцию, вытекает, что  $u(x, t) > u_{\min}$  при всех  $x \geq \sigma(t)$ , а при  $x < \sigma(t)$  функция убывает и в некоторый момент функция  $u(0, t)$  достигнет значения  $u_{\min}$ . После этого процесс повторится, но уже «в другую сторону», для другого знака оператора Лизеганга.

## 2 Задача на одном из отрезков

Рассмотрим задачу Флорина на одном из отрезков в смысле [5]. Пусть этот отрезок  $x \in [0; x_0(t)]$ , где  $x_0(t)$  — координата правого конца отрезка, соответствующего положительному знаку оператора Лизеганга  $L[u(x, t)]$ . В результате задача (2) с добавленными начальными и краевыми условиями примет вид:

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} u + \alpha u, & u = u(x, t) \\ \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{x=x_0(t)} = 0, & x \in (0; x_0(t)), \quad t \in (0; \infty) \\ u|_{t=0} = u_{min} + (u_{max} - u_{min}) \sin(\pi x), & u|_{x=0} = u_{min}, \quad u|_{x=x_0(t)} = u_{max}, \quad x_0(0) = \frac{1}{2} \end{cases} \quad (3)$$

Существование и единственность решения (3) в смысле [5] гарантируется работой [5], мы же попытаемся построить решение этой задачи. Для этого выполним замену переменной [7]:  $\xi = \frac{x}{x_0(t)}$ , в результате получим из задачи (3)

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = \frac{x'_0(t)}{x_0(t)} \xi \frac{\partial u}{\partial \xi} + \frac{1}{x_0^2(t)} \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} u + \alpha u, & u = u(\xi, t) \\ \frac{\partial u}{\partial \xi} \Big|_{\xi=1} = 0, & \xi \in (0; 1), \quad t \in (0; \infty) \\ u|_{t=0} = u_{min} + (u_{max} - u_{min}) \sin(\pi \xi / 2), & u|_{\xi=0} = u_{min}, \quad u|_{\xi=1} = u_{max}, \quad x_0(0) = \frac{1}{2} \end{cases} \quad (4)$$

где  $x'_0(t) \equiv \frac{dx_0(t)}{dt}$ .

В (4) сделаем замену:  $y(t) = x_0^2(t)$ .

Решение (4) будем искать в виде ряда по собственным функциям смешанной (краевые условия первого и второго рода) задачи Штурма — Лиувилля для второй производной на отрезке  $\xi \in [0; 1]$ :

$$\begin{cases} \frac{d^2 z}{d\xi^2} + \lambda^2 z = 0, & \xi \in (0; 1), \\ z|_{\xi=0} = 0, & \frac{dz}{d\xi} \Big|_{\xi=1} = 0, \end{cases}$$

то есть в виде:

$$u(\xi, t) = u_{min} + \sum_{j=0}^{\infty} v_j(t) \sin(\lambda_j \xi),$$

где  $\lambda_j = \frac{\pi}{2}(2j+1)$ . В результате замен и преобразований получаем:

$$\begin{cases} y \frac{dv_j}{dt} = \frac{1}{2} y' \sum_{k=0}^{\infty} \beta_{jk} v_k - \lambda_j^2 v_j + \alpha y v_j + \alpha y \gamma_j, \\ v_j|_{t=0} = p_j, \quad p_j = (u_{max} - u_{min}) \delta_{j1}, \quad \gamma_j = 2u_{min} \int_0^1 \sin(\lambda_j \xi) d\xi \\ \sum_{j=0}^{\infty} (-1)^j v_j = (u_{max} - u_{min}) \equiv u_0, \quad \beta_{jk} = 2\lambda_k \int_0^1 \sin(\lambda_j \xi) \cos(\lambda_k \xi) \xi d\xi, \quad y(0) = \frac{1}{4} \end{cases} \quad (5)$$

(здесь и далее штрих будет означать производную по времени,  $\delta_{ij}$  — символ Кронекера).

Таким образом, необходимо решить задачу (5). Отметим, что система  $\{\sin(\lambda_j \xi)\}_{j=0}^{\infty}$  полна и ортогональна на отрезке  $\xi \in [0; 1]$  [6]. Таким образом, если удастся построить решение (5), то мы сможем решить и (2). Более того, по построению (5) должна иметь единственное решение (далее мы проведём доказательство).

### 3 Свойства функций $v_j$

Докажем, что функции  $v_j$  в (5) определены единственным образом и их можно найти с помощью итерационного процесса.

Из [5] известно, что  $y$  и  $\frac{dy(t)}{dt} \equiv y'(t)$  существуют и единственны. По построению  $y$  ограничена:  $0 < \max_{t \in (0; +\infty)} |y| \leq 0.25$ ,  $y'$  — существует и также ограничена.

Докажем сходимость ряда  $\sum_{k=0}^{\infty} \beta_{jk} v_k$ . Для этого построим итерационный процесс, считая, что  $y$  уже известна, и покажем, что процесс сходится.

Итерационный процесс будем строить как решение дифференциального уравнения для всех  $j > J$ , таких, что  $\lambda_j \geq \max_{t \in (0; \infty)} \left| B_j \frac{A}{y} \frac{dy}{dt} \right| \equiv Q_0$ , где  $A$  — постоянная, обусловленная функцией в начальном условии (в нашем случае она не превышает  $u_{max}$ ),  $B_j$  — величина, зависящая от индекса  $j$ , определяемая суммированием ряда. Будем считать, что решения всех дифференциальных уравнений для  $j \leq J$  известны.

Пусть на итерации номер  $m$  построено решение  $v_j^{(m)}$ . Итерационный процесс при  $j \geq J$  имеет вид:

$$\begin{cases} \frac{dv_j^{(m+1)}}{dt} = p_j \exp(-\lambda_j^2 t) + \int_0^t \left( \frac{y'(\tau)}{2y(\tau)} \sum_{k=0}^{\infty} \beta_{jk} v_k^{(m)}(\tau) + \alpha v_j^{(m)}(\tau) + \alpha \gamma_j \right) \exp\left(-\lambda_j^2 \int_{\tau}^t \frac{ds}{y(s)}\right) d\tau, & j \geq J, \\ v_j^{(0)} = p_j \exp(-\lambda_j^2 t) \end{cases} \quad (6)$$

Несложно видеть, что итерационный процесс (6) будет сходиться для всех  $j > J$ . Действительно, ряд  $\sum_{k=0}^{\infty} \beta_{jk} v_k^{(0)}$  состоит всего из одного слагаемого и допускает равномерную оценку по  $j$  и  $t$ :  $|\sum_{k=0}^{\infty} \beta_{jk} v_k^{(0)}| < K$ ,  $K = const$ . Учитывая вид интегрального оператора, заметим, что мы получим оценку вида  $\max_{t \in (0; +\infty)} |v_j^{(1)} - v_j^{(0)}| \leq \frac{Q_0}{\lambda_j^2} \leq 1$ , откуда  $v_j^{(1)} \leq v_j^{(0)} + \frac{Q_0}{\lambda_j^2}$ . Несложно видеть, что все последующие шаги итерационного процесса также будут приводить к сходящимся рядам.

Теперь пусть первые  $J$  функций  $v_j^{(m+1)}$  найдены как решения соответствующих дифференциальных уравнений (ряды в этих уравнениях будут сходящимися) по известным  $v_j^{(m)}$ , полученным на предыдущей итерации с помощью, например, численного метода (заметим, что система таких уравнений конечна). Будет справедлива оценка  $\max_{t \in (0; +\infty)} |v_j^{(m+1)} - v_j^{(m)}| \leq \frac{Q_0}{\lambda_j^2} \max_{t \in (0; +\infty), k} |v_k^{(m)} - v_k^{(m-1)}|$ , где  $B_j = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\beta_{kj}}{\lambda_k^2}$ . Несложно видеть, что коэффициент  $|B_j| \leq \frac{S}{\lambda_j}$ , где  $S = const > 0$ . (Напомним, что  $Q_0$  содержит  $B_j$ ). Таким образом, итерационный процесс сходится, решение системы (5) единственно, и процесс сходится к точному решению.

## 4 Вывод уравнения для $y$

Рассмотрим сначала систему (5). Разделим дифференциальное уравнение на  $\lambda_j^2 - \alpha y$ , и получим в результате выражение:

$$\begin{cases} \frac{y}{\lambda_j^2 - \alpha y} \frac{dv_j}{dt} = \frac{1}{2} y' \sum_{k=0}^{\infty} \frac{v_k \beta_{jk}}{\lambda_j^2 - \alpha y} - v_j + \alpha y \frac{\gamma_j}{\lambda_j^2 - \alpha y}, \\ v_j|_{t=0} = p_j, \quad y(0) = \frac{1}{4}, \quad \sum_{j=0}^{\infty} (-1)^j v_j = u_0 \end{cases} \quad (7)$$

Построим уравнение для  $y$ . Для этого в (7) дифференциальное уравнение умножим на  $(-1)^j$  и просуммируем по переменной  $j$ .

$$\begin{cases} y \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-1)^j}{\lambda_j^2 - \alpha y} \frac{dv_j}{dt} = \frac{1}{2} y' \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{v_k (-1)^j \beta_{jk}}{\lambda_j^2 - \alpha y} - \sum_{j=0}^{\infty} (-1)^j v_j + \alpha y \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-1)^j \gamma_j}{\lambda_j^2 - \alpha y}, \\ v_j|_{t=0} = p_j, \quad y(0) = \frac{1}{4}, \quad \sum_{j=0}^{\infty} (-1)^j v_j = u_0 \end{cases} \quad (8)$$

Вычислим суммы, присутствующие в (8). Отметим, что  $\sum_{j=0}^{\infty} (-1)^j v_j = u_0$ . Введём сумму  $U_2 = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-1)^j v_j}{\lambda_j^2 - \alpha y}$  и  $U_4 = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-1)^j v_j}{(\lambda_j^2 - \alpha y)^2}$ . Несложно видеть, что, раз  $v_j$  равномерно ограничены, а функция  $y$  и параметр  $\alpha$  невелики, то ряды  $U_2$  и  $U_4$  сходятся равномерно.

Учитывая  $\beta_{jk} = 2\lambda_k \int_0^1 \sin(\lambda_j \xi) \xi \cos(\lambda_k \xi) d\xi$ , переставляя суммы (ряд сходится абсолютно), получим [9] для двойной суммы  $\sum_{j=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{v_k (-1)^j \beta_{jk}}{\lambda_j^2 - \alpha y}$ :

$$\sum_{k=0}^{\infty} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{v_k (-1)^j \beta_{jk}}{\lambda_j^2 - \alpha y} = u_0 \frac{\operatorname{tg}(\sqrt{\alpha y})}{\sqrt{\alpha y}} + \{\sqrt{\alpha y} \operatorname{tg}(\sqrt{\alpha y}) - 2\} U_2 - 2\alpha y U_4.$$

Учитывая выражение для  $\gamma_j$ , получим для суммы  $\alpha y \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-1)^j \gamma_j}{\lambda_j^2 - \alpha y}$  соотношение [9]:

$$\alpha y \sum_{j=0}^{\infty} \frac{2(-1)^j \gamma_j}{\lambda_j^2 - \alpha y} = \frac{u_{\min}}{\cos(\sqrt{\alpha y})} (1 - \cos(\sqrt{\alpha y})).$$

Таким образом, задача (8) примет вид:

$$\left\{ \begin{array}{l} y \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-1)^j}{\lambda_j^2 - \alpha y} \frac{dv_j}{dt} = \frac{1}{2} y' \left( u_0 \frac{\operatorname{tg}(\sqrt{\alpha y})}{\sqrt{\alpha y}} + \{\sqrt{\alpha y} \operatorname{tg}(\sqrt{\alpha y}) - 2\} U_2 - 2\alpha y U_4 \right) - u_0 + \\ \quad + \frac{u_{\min}}{\cos(\sqrt{\alpha y})} (1 - \cos(\sqrt{\alpha y})), \\ v_j|_{t=0} = p_j, \quad y(0) = \frac{1}{4}, \quad \sum_{j=0}^{\infty} (-1)^j v_j = u_0 \end{array} \right.$$

Теперь отметим, что  $\sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-1)^j}{\lambda_j^2 - \alpha y} \frac{dv_j}{dt} = \frac{dU_2}{dt} - \alpha y' U_4$  и окончательно получим уравнение для  $y(t)$ :

$$\left\{ \begin{array}{l} y U_2' = \frac{1}{2} y' \left( u_0 \frac{\operatorname{tg}(\sqrt{\alpha y})}{\sqrt{\alpha y}} + \{\sqrt{\alpha y} \operatorname{tg}(\sqrt{\alpha y}) - 2\} U_2 \right) - u_0 + \frac{u_{\min}}{\cos(\sqrt{\alpha y})} (1 - \cos(\sqrt{\alpha y})), \\ v_j|_{t=0} = p_j, \quad y(0) = \frac{1}{4}, \quad \sum_{j=0}^{\infty} (-1)^j v_j = u_0 \end{array} \right. \quad (9)$$

Уравнение (9) включим в итерационный процесс (6), рассматривая  $y^{(m+1)}$  как решение дифференциального уравнения при известных  $U_2^{(m)}$  и  $U_4^{(m)}$ , т.е. считая, что  $v_j^{(m)}$  найдены на предыдущих шагах итерационного процесса, и из них можно построить равномерно сходящиеся ряды  $U_2^{(m)}$  и  $U_4^{(m)}$ .

Отметим, что при таком подходе рассуждения, сделанные выше для итерационного процесса с истинным значением  $y$ , остаются в силе. В силу единственности решения обыкновенного дифференциального уравнения (9) алгоритм с добавленным уравнением (9) будет сходиться к точному решению всей задачи на заданном отрезке.

Таким образом, шаг итерационного метода для решения задачи на отрезке имеет вид (одна итерация):

1. Задачи для  $v_j$ ,  $j \leq J$  решаются обычным численным методом (эта система жёсткая) по известным значениям с предыдущего шага итерационного процесса.
2. Задачи для  $v_j$ ,  $j > J$  решаются итерациями, процесс сходится.
3. Задача для  $y$  — обычное дифференциальное уравнение, которое решается численно.

Фактически, учитывая очень быструю сходимость при достаточно больших  $j$ , мы получим конечную (и не очень большую) систему обыкновенных дифференциальных уравнений.

## Заключение

Таким образом, с помощью разложения исходной задачи в ряд построен итерационный процесс для решения задачи (2). Решение задачи требует применения численного метода и итераций.

По известному решению задачи о движении границы может быть найдено и полное решение задачи как решение неограниченной системы уравнений. Численные методы для сходных задач приводятся в [4].

Для других отрезков, на которые задача (2) разобьёт область решения, алгоритм может быть построен сходным образом (необходимо только сдвинуть одну из известных границ в нуль, после чего рассуждения можно воспроизвести почти полностью).

## Список литературы

- [1] Liesegang R. Silberchromatringe und –spiralen // Z. Physik. Chemie. 1914. V. 88 P. 1–12.
- [2] Лурье А. А. Теория колец Лизеганга // Коллоидный журнал. 1966. Т. 28. С. 534–537.
- [3] Ильин А. М., Марков Б. А. Уравнение нелинейной диффузии и кольца Лизеганга // ДАН РФ, серия “Математика”, 2011. Т. 2. С. 164–167.
- [4] Самарский А. А., Вабищевич П. Н. Вычислительная теплопередача. // Москва: Editorial URSS. 2003. — 427 с.
- [5] Бижанова Г.И. О классической разрешимости одномерных задач со свободной границей Флорина, Маскета-Веригина и Стефана // Краевые задачи математической физики и смежные вопросы теории функций. 28, Зап. научн. сем. ПОМИ, 243, ПОМИ, СПб. 1997. Т. 243. С. 30–60.
- [6] Свешников А. Г., Боголюбов А. Н., Кравцов В. В. Лекции по математической физике // Изд-во МГУ. 1993. — 352 с.
- [7] Карташов Е. М. Аналитические методы теплопроводности в твёрдых телах // М., 2001. — 550 с.
- [8] Дельмон Б. Кинетика гетерогенных реакций // Изд-во Мир. 1972. — 560 с.
- [9] Прудников А.П., Брычков Ю.А., Маричев О.И. Интегралы и ряды. Элементарные функции. // Т 1. Изд-во ФизМатЛит. 2003. — 688 с.

*Борис Анатольевич Марков — к.ф.-м.н., доцент кафедры вычислительной математики и эффективных  
вычислений Южно-Уральского государственного университета;  
e-mail: stpx1969@mail.ru.*

*Дата поступления — 10 мая 2017 г.*