

## ПРОЕКЦІЙНО СІТКОВА СХЕМА РОЗВ'ЯЗУВАННЯ ЕВОЛЮЦІЙНИХ ЗАДАЧ ОКИСНЕННЯ ЧАДНОГО ГАЗУ НА ПОВЕРХНІ ПЛАТИНИ

**О. Вовк<sup>\*</sup>, Н. Павленко<sup>\*\*</sup>, Г. Шинкаренко<sup>\*\*\*\*</sup>, В. Вовк<sup>\*</sup>**

*<sup>\*</sup>Львівський національний університет імені Івана Франка,  
бул. Університетська, 1, Львів, 79000, e-mail: [kis@franko.lviv.ua](mailto:kis@franko.lviv.ua)*

*<sup>\*\*</sup>Інститут фізики конденсованих систем НАН України,  
бул. Свенціцького, 1, Львів, 79011, e-mail: [icmp@icmp.lviv.ua](mailto:icmp@icmp.lviv.ua)*

*<sup>\*\*\*</sup>Політехніка Опольська,  
бул. Любошицька, 5, Опольце, Польща, e-mail: [iro@po.opole.pl](mailto:iro@po.opole.pl)*

Числовий аналіз математичних моделей широко застосованих на практиці явищ автокаталізу хімічних реакцій на поверхнях металів значно ускладнюється наявністю еволюційності та нелінійності у вихідних співвідношеннях задачі. Дискретизація кількох шуканих функцій (хімічні реагенти та характеристики поверхні) у часі та за просторовими змінними, а також апроксимація нелінійності приводять до трудомісткого числового експериментування.

Застосовано схему [4], яка з узгодженням похибок сумішає ітераційні процеси дискретизації в часі та лінеаризації варіаційних рівнянь моделі. Це дало змогу з використанням скінчено-елементних апроксимацій побудувати і реалізувати алгоритми аналізу перебігу трикомпонентної автокаталітичної реакції окиснення чадного газу на поверхні платини [1].

*Ключові слова:* дискретизація, лінеаризація, МСЕ, автокаталіз.

### 1. ВСТУП

Використання процесів окиснення чадного газу на поверхні платини в автомобільних каталізаторах – це лише один з багатьох прикладів, який демонструє масштаби практичного застосування хімічних реакцій на твердих поверхнях. Не менш важливе місце вони займають і в гетерогенному каталізі, мікроелектроніці та багатьох інших сферах.

Перспективи оптимізації затрат для підтримки таких реакцій зумовлюють значний інтерес до їхнього вивчення, зокрема засобами математичного моделювання [5]. Втім складна поведінка реагентів приводить до нелінійних початково-крайових задач [1]. У класичних схемах їхнього чисельного аналізу це означає необхідність виконання на кожному кроці інтегрування у часі певної кількості ітерацій методу Ньютона, що накладає жорсткі обмеження на параметри просторової дискретизації задачі, особливо враховуючи наявність кількох шуканих значень у кожному вузлі сітки.

Ми використали запропонований в [4] метод напівдискретизації задачі за часом, ітераційний процес якого суміщається з її лінеаризацією. Завдяки збереженню однакових порядків збіжності у часі зрівноважено похибки напівдискретизації та лінеаризації.

Дискретизацію задачі за просторовими змінними виконано методом скінчених елементів з використанням кусково-лінійних апроксимацій Куранта та біквадратичних серендипових апроксимацій на криволінійних чотирикутниках.

Запропонована схема розв'язування задачі лежить в основі програмного забезпечення, з допомогою якого на багатьох модельних задачах виконано апробацію

побудованих чисельних схем, перевірку їх на точність та швидкість збіжності. Практичний результат дали дослідження однієї з вживаних моделей трикомпонентної автокаталітичної реакції окиснення чадного газу на поверхні платини. Зокрема, виявлено шлях уточнення моделі, яка допускає важливі для практики незатухаючі автоколивні режими роботи [6].

## 2. ФОРМУЛЮВАННЯ ЗАДАЧІ

Відкриття Г. Ертлем автоколивного процесу окиснення чадного газу  $2\text{CO} + \text{O}_2 = 2\text{CO}_2$  на поверхні платини Pt започаткувало вивчення принципово нового виду автоколивних хімічних реакцій, у яких каталізуючою компонентою є не хімічний реагент, а структура твердої поверхні металу. Він зауважив, що на вільній поверхні атоми Pt утворюють шестигранну кристалічну ґратку, яка сприяє активній адсорбції чадного газу CO з навколишнього середовища. За умови досягнення чадним газом деякої критичної концентрації поверхневі атоми платини стрибкоподібно перебудовуються у квадратну структуру. Нова форма кристалічної ґратки підвищує адсорбцію молекул кисню  $\text{O}_2$ , які безпосередньо вступають у реакцію з чадним газом, очищаючи від нього поверхню платини. Зниження концентрації CO до певної критичної позначки ініціює зворотню стрибкоподібну реконструкцію квадратної ґратки у початковий гексагональний вигляд і цикл реакції починається від початку.

У праці [1] описаний вище процес змодельовано такою безрозмірною початково-крайовою задачею дифузії-реакції знайти вектор концентрацій складників  $\mathbf{u} = \{a(\mathbf{x}, t), n(\mathbf{x}, t), b(\mathbf{x}, t)\}$  такий, що

$$\begin{cases} \partial_t a - \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} a = f_1(\mathbf{u}) := p_A (1-a) s_A - d_A a - r B_S a b \\ \quad = -[p_A s_A + d_A + r B_S b] a + p_A s_A, \\ \partial_t n - \nabla_{\mathbf{x}} \cdot (\eta \nabla_{\mathbf{x}} n) = f_2(\mathbf{u}) := n(1-n) \theta (a - a_c^1) a - \gamma n (1-a)^2 \\ \quad = n[(1-n) \theta (a - a_c^1) a - \gamma (1-a)^2] n \quad \text{в } \Omega \times (0, T], \end{cases} \quad (1.1)$$

$$\partial_t b = f_3(\mathbf{u}) := p_B n (1-a-b)^2 \theta (1-b) - r A_S a b \quad \text{на } (0, T], \quad (1.2)$$

$$\mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} a = \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} n = 0 \quad \text{на } \Gamma \times [0, T] \quad (1.3)$$

$$\mathbf{u}|_{t=0} = \mathbf{u}^0 \quad \text{в } \Omega \quad (1.4)$$

Тут, окрім безрозмірних (в межах інтервалу  $[0, 1]$ ) поверхневих концентрацій чадного газу  $a = a(\mathbf{x}, t)$  та кисню  $b = b(\mathbf{x}, t)$ , окремою фазовою змінною є  $n = n(\mathbf{x}, t)$  – ступінь реконструкції поверхні, яка займає область  $\Omega \subset \mathbb{R}^2$  з неперервною за Ліпшицем межею  $\Gamma$ ;  $\mathbf{v} = \{v_i\}_{i=1}^2$ ,  $v_i = \cos(\mathbf{v}, x_i)$ , є одиничним вектором зовнішньої нормалі до межі  $\Gamma$ ;

$$\partial_t w = \partial w / \partial t, \quad \nabla_{\mathbf{x}} w = \{\partial w / \partial x_i\}_{i=1}^2$$

– градієнт скалярної функції  $w = w(\mathbf{x}, t)$  за просторовими змінними  $\mathbf{x} = (x_1, x_2) \in \mathbb{R}^2$ ,  $t$  часова змінна  $[0, T]$ ,  $0 < T < +\infty$ ,

$$\mathbf{w} \cdot \mathbf{z} := \sum_{i=1}^d w_i z_i \quad \forall \mathbf{w}, \mathbf{z} \in \mathbb{R}^d.$$

Реакція на плоскій поверхні  $\Omega$  відбувається при температурі  $T_K$  із швидкістю  $r = 2 \cdot 10^{10} e^{-121/T_K}$ . Параметри  $p_A = 0.225 p_A^0$  та  $p_B = p_B^0 a_K^0 B_S^{-1}$  відповідають парціальним тискам чадного газу (CO) та кисню ( $\text{O}_2$ ), відповідно

$$S_A = S_A^0(1-n) + S_A^1 n$$

– коефіцієнт поглинання чадного газу на поверхні, де

$$S_A^0 = 0.75, S_A^1 = 0.34, d_A = d_A^0(1-n) + d_A^1 n$$

– значення поверхневої дифузії чадного газу, де

$$d_A^0 = 4 \cdot 10^{13} e^{-138T_k^{-1}}, d_A^1 = 3 \cdot 10^{15} e^{-174T_k^{-1}}.$$

Коефіцієнт

$$\gamma = \frac{\gamma_{10}}{\gamma_{01}}$$

є відношенням швидкості поверхневого переходу кристалічної ґратки з квадратної структури у гексагональну  $\gamma_{10}$  до швидкості зворотного переходу  $\gamma_{01}$ ,  $d_A$  – коефіцієнт десорбції СО з поверхні,  $A_s$  та  $B_s$  – коефіцієнти насичення поверхні покриття молекулами СО та  $O_2$ , відповідно;  $\eta$  – дифузія СО. Моделювання стрибкоподібної перебудови кристалічної ґратки виконується за допомогою функції

$$\theta(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ 1, & x \geq 0. \end{cases}$$

Фізичний зміст цих та інших коефіцієнтів моделі (1.1)-(1.4) детальніше описано в [1].

З метою створення комп'ютерних засобів числового аналізу цієї та подібних задач автокаталізу узагальнимо описану вище математичну модель до такої початково-крайової задачі:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{задано } \mathbf{u}^0 = \{u_i^0(\mathbf{x})\}_{i=1}^p, \quad \mu^k = \{\mu_{ij}^k(\mathbf{x})\}_{i,j=1}^2, \\ \rho = \{\rho_i(\mathbf{x})\delta_{ij}\}_{i,j=1}^p, \quad \sigma = \{\sigma_i(\mathbf{x})\delta_{ij}\}_{i,j=1}^p, \quad \mathbf{f} = \{f_i(\mathbf{u})\}_{i=1}^p; \\ \text{знайти вектор } \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \{u_i(\mathbf{x}, t)\}_{i=1}^p \text{ такий, що} \\ \rho_k \partial_t u_k - \nabla_x \cdot (\mu^k \nabla_x u_k) + \sigma_k u_k = f_k(\mathbf{u}) \quad \text{в } \Omega \times (0, T], \\ -(\mu^k \nabla_x u_k) \cdot \mathbf{v} = \psi_k(\mathbf{u}) \quad \text{на } \Gamma_q \times [0, T], \Gamma_q \subset \Gamma, \\ \text{mes}(\Gamma_q) > 0, \quad k = 1, \dots, p, \\ \mathbf{u} = \mathbf{0} \quad \text{на } \Gamma_u \times [0, T], \Gamma_u = \Gamma \setminus \Gamma_q, \\ \mathbf{u}|_{t=0} = \mathbf{u}^0 \quad \text{в } \Omega. \end{array} \right. \quad (1.5)$$

Далі нам буде потрібно варіаційне формулювання початково-крайової задачі (1.5). З цією метою помножимо рівняння з (1.5) скалярно на довільну допустиму функцію  $\mathbf{v} \in \mathbf{V} = \{\mathbf{v} \in [H^1(\Omega)]^p : \mathbf{v} = \mathbf{0} \text{ на } \Gamma_u\}$  та проінтегруємо результат по області  $\Omega$  з використанням формули Гріна. У підсумку прийдемо до еволюційної варіаційної задачі, яка становитиме основний об'єкт нашого дослідження,

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{знайти } \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \{u_i(\mathbf{x}, t)\}_{i=1}^p \in L^\infty(0, T; [L^2(\Omega)]^p) \cap L^2(0, T; \mathbf{V}) \\ \text{такий, що задовольняє рівняння} \\ m(\mathbf{u}'(t), \mathbf{v}) + B(\mathbf{u}(t), \mathbf{v}) = \langle N[\mathbf{u}(t)], \mathbf{v} \rangle \quad \forall t \in (0, T], \\ m(\mathbf{u}(0) - \mathbf{u}^0, \mathbf{v}) = 0 \quad \forall \mathbf{v} \in \mathbf{V}. \end{array} \right. \quad (1.6)$$

Тут і нижче білінійні форми лівої частини рівняння та нелінійний (щодо першого аргумента) функціонал визначено так:

$$\left\{ \begin{array}{l} m(\mathbf{u}, \mathbf{v}) := \int_{\Omega} (\rho \mathbf{u}), \mathbf{v} \, dx \\ B(\mathbf{u}, \mathbf{v}) := \int_{\Omega} [\sum_{k=1}^p (\mu^k \nabla_x u_k) \cdot \nabla_x v_k + (\sigma \mathbf{u}), \mathbf{v}] \, dx \\ \langle N[\mathbf{w}], \mathbf{v} \rangle := \int_{\Omega} \mathbf{v} \cdot \mathbf{f}(\mathbf{w}) \, dx + \int_{\Gamma_q} \mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\psi}(\mathbf{w}) \, d\gamma \quad \forall \mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{w} \in \mathbf{V}. \end{array} \right. \quad (1.7)$$

Для розв'язування варіаційної задачі (1.5), з огляду на праці [3,4], пропонуємо проекційно-сіткову схему, в основу якої покладено такі головні компоненти:

(I) дискретизація Петрова-Гальоркіна за часовою змінною з використанням частинами лінійної апроксимації розв'язку, яка приведе до необхідності рекурентного розв'язування послідовності стаціонарних варіаційних задач на кожному кроці довжини  $\Delta t$  поділу відрізка часу  $[0, T]$ ;

(II) апроксимація нелінійного механізму перебігу хімічної реакції, який описується заданими векторами  $\mathbf{f} = \{f_i(\mathbf{u})\}_{i=1}^p$  та  $\boldsymbol{\psi} = \{\psi_i(\mathbf{u})\}_{i=1}^p$  моделі так, що її точність за порядком величини кроку інтегрування в часі  $\Delta t$  збігатиметься з порядком апроксимації згаданої вище дискретизації Петрова-Гальоркіна;

(III) дискретизація Гальоркіна за просторовими змінними, яка допускає використання на вибір будь-якого з класичних підпросторів апроксимацій методу скінчених елементів у просторі  $\mathbf{V} \in [H^1(\Omega)]^p$ .

### 3. НАПІВДИСКРЕТИЗАЦІЯ В ЧАСІ ТА ЛІНЕАРИЗАЦІЯ

Сучасні підходи до побудови рекурентних процедур інтегрування початково-крайових задач у часі є доволі різноманітними та розвинутими. Далі ми послуговуватимось технікою з [7]. В частині боротьби з нелінійністю задачі надзбіжність методу Ньютона і його різноманітних модифікацій залишає небагато простору для використання інших підходів. Отож, класична схема потребує на кожному кроці дискретизації у часі виконання кількох ітерацій Ньютона. З огляду на обчислювальну затратність просторових апроксимацій МСЕ зменшення загальної кількості ітерацій є критично важливим завданням.

Далі, з використанням техніки з [4],[7], ми побудуємо схему, в якій процес лінеаризації задачі суміщено з ітераціями дискретизації задачі в часі. У цьому разі похибка апроксимації в часі врівноважується з похибкою лінеаризації.

#### 3.1. АПРОКСИМАЦІЯ ЗА ЧАСОВОЮ ЗМІННОЮ

Поділимо відрізок часу  $[0, T]$  на  $M$  рівних проміжків  $[t_j, t_{j+1}]$ ,  $j = 0, \dots, M-1$ , на кожному з яких апроксимуємо шуканий розв'язок  $\mathbf{u} = \mathbf{u}(t)$  задачі (1.5) лінійними виразами

$$\begin{aligned} \mathbf{u}(t) &\approx \mathbf{u}_{\Delta t}(t) := \mathbf{u}^j + \omega_j(t)(\mathbf{u}^{j+1} - \mathbf{u}^j) \\ &= \mathbf{u}^j + \Delta t \omega_j(t) \dot{\mathbf{u}}^{j+1/2} \quad \forall t \in [t_j, t_{j+1}], \quad j = 0, 1, \dots, M-1, \end{aligned} \quad (2.1)$$

де

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{u}}^{j+1/2} &:= \Delta t^{-1}(\mathbf{u}^{j+1} - \mathbf{u}^j), \quad \Delta t = t_{j+1} - t_j, \\ \omega_j(t) &:= \Delta t^{-1}(t - t_j) \quad \forall t \in [t_j, t_{j+1}]. \end{aligned}$$

З огляду на початкову умову задачі (1.5) надалі будемо вважати, що вектор

$$\mathbf{u}^j = \mathbf{u}_{\Delta t}(t_j) \cong \mathbf{u}(t_j)$$

знайдено з попередніх кроків інтегрування в часі так, що у (2.1) невідомим залишається вектор  $\mathbf{u}^{j+1} \in \mathbf{V}$  або  $\dot{\mathbf{u}}^{j+1/2} \in \mathbf{V}$ . Саме його ми й прийемо за шукане невідоме.

### 3.2. ЛІНЕАРИЗАЦІЯ ФУНКЦІОНАЛА ЗАДАЧІ ДИФУЗІЇ-РЕАКЦІЇ

Поряд з цим на проміжку часу  $[t_j, t_{j+1}]$  лінеаризуємо праву частину

$$\langle N[\mathbf{u}(t)], \mathbf{v} \rangle = \int_{\Omega} \mathbf{f}[\mathbf{u}(t)] \cdot \mathbf{v} \, dx + \int_{\Gamma_q} \boldsymbol{\Psi}[\mathbf{u}(t)] \cdot \mathbf{v} \, d\gamma \quad (2.2)$$

рівняння варіаційної задачі (1.5). Для цього припустимо, що довільна задана функція  $g(\mathbf{u}): R^p \rightarrow R$  достатньо регулярна, щоб можна було скористатися розвиненням за формулою Тейлора в околі точки  $\mathbf{u}^j$ , а саме, її найпростішим варіантом вигляду

$$\begin{aligned} g(\mathbf{u}) &= g(\mathbf{u}^j) + \sum_{s=1}^p [(u_s - u_s^j) \frac{\partial}{\partial u_s} g(\mathbf{u}^j)] + O(\|\mathbf{u} - \mathbf{u}^j\|^2) \\ &= g(\mathbf{u}^j) + (\mathbf{u} - \mathbf{u}^j) \cdot \nabla_{\mathbf{u}} g(\mathbf{u}^j) + O(\|\mathbf{u} - \mathbf{u}^j\|^2) \\ &\cong g(\mathbf{u}^j) + (\mathbf{u} - \mathbf{u}^j) \cdot \nabla_{\mathbf{u}} g(\mathbf{u}^j) \quad \forall \mathbf{u} \in \mathbf{V}, \quad j = 0, 1, \dots, M, \end{aligned} \quad (2.3)$$

або після заміни вектора невідомих  $\mathbf{u}(t)$  на його апроксимацію  $\mathbf{u}_{\Delta t}(t)$

$$\begin{aligned} g(\mathbf{u}_{\Delta t}(t)) &= g(\mathbf{u}^j + \Delta t \omega_j(t) \dot{\mathbf{u}}^{j+1/2}) \\ &= g(\mathbf{u}^j) + \Delta t \omega_j(t) \sum_{s=1}^p \dot{u}_s^{j+1/2} \frac{\partial}{\partial u_s} g(\mathbf{u}^j) + [\Delta t \omega_j(t)]^2 O(\|\dot{\mathbf{u}}^{j+1/2}\|^2) \\ &= g(\mathbf{u}^j) + \Delta t \omega_j(t) \dot{\mathbf{u}}^{j+1/2} \cdot \nabla_{\mathbf{u}} g(\mathbf{u}^j) + [\Delta t \omega_j(t)]^2 O(\|\dot{\mathbf{u}}^{j+1/2}\|^2) \\ &\cong g(\mathbf{u}^j) + \Delta t \omega_j(t) \dot{\mathbf{u}}^{j+1/2} \cdot \nabla_{\mathbf{u}} g(\mathbf{u}^j) \quad \forall t \in [t_j, t_{j+1}]. \end{aligned} \quad (2.4)$$

Використаємо розвинення (2.4) для апроксимації значень векторних функцій  $\mathbf{f}[\mathbf{u}_{\Delta t}(t)]$  та  $\boldsymbol{\Psi}[\mathbf{u}_{\Delta t}(t)]$  з правої частини (2.2) на проміжку  $[t_j, t_{j+1}]$ . У підсумку одержимо, що

$$\begin{aligned} \langle \Pi[\mathbf{u}(t)], \mathbf{v} \rangle &\cong \langle \Pi[\mathbf{u}_{\Delta t}(t)], \mathbf{v} \rangle \\ &= \int_{\Omega} \mathbf{f}[\mathbf{u}^j + \Delta t \omega_j(t) \dot{\mathbf{u}}^{j+1/2}] \cdot \mathbf{v} \, dx + \int_{\Gamma_q} \boldsymbol{\Psi}[\mathbf{u}^j + \Delta t \omega_j(t) \dot{\mathbf{u}}^{j+1/2}] \cdot \mathbf{v} \, d\gamma \\ &\cong \int_{\Omega} \mathbf{f}[\mathbf{u}^j] \cdot \mathbf{v} \, dx + \int_{\Gamma_q} \boldsymbol{\Psi}[\mathbf{u}^j] \cdot \mathbf{v} \, d\gamma \\ &\quad + \Delta t \omega(t) \sum_{k,m=1}^p \left\{ \int_{\Omega} \dot{u}_k^{j+1/2} \frac{\partial}{\partial u_k} f_m(\mathbf{u}^j) v_m \, dx + \int_{\Gamma_q} \dot{u}_k^{j+1/2} \frac{\partial}{\partial u_k} \psi_m(\mathbf{u}^j) v_m \, d\gamma \right\} \\ &= \langle \Pi[\mathbf{u}^j], \mathbf{v} \rangle \\ &\quad + \Delta t \omega(t) \left\{ \int_{\Omega} \dot{\mathbf{u}}^{j+1/2} \cdot \nabla_{\mathbf{u}} [\mathbf{f}(\mathbf{u}^j) \cdot \mathbf{v}] \, dx + \int_{\Gamma_q} \dot{\mathbf{u}}^{j+1/2} \cdot \nabla_{\mathbf{u}} [\boldsymbol{\Psi}(\mathbf{u}^j) \cdot \mathbf{v}] \, d\gamma \right\}. \end{aligned} \quad (2.5)$$

Якщо тепер ввести функціонал

$$\mathfrak{R}(\mathbf{u}^j; \dot{\mathbf{u}}^{j+1/2}, \mathbf{v}) := \int_{\Omega} \dot{\mathbf{u}}^{j+1/2} \cdot \nabla_{\mathbf{u}} [\mathbf{f}(\mathbf{u}^j) \cdot \mathbf{v}] \, dx + \int_{\Gamma_q} \dot{\mathbf{u}}^{j+1/2} \cdot \nabla_{\mathbf{u}} [\boldsymbol{\Psi}(\mathbf{u}^j) \cdot \mathbf{v}] \, d\gamma, \quad (2.6)$$

то можна зауважити, що він є білінійною формою двох останніх аргументів: шуканої швидкості зміни апроксимації розв'язку  $\dot{\mathbf{u}}^{j+1/2} \in \mathbf{V}$  та, як і раніше, допустимого вектора  $\mathbf{v} \in \mathbf{V}$ .

Відтак структуру функціонала  $\langle \Pi[\mathbf{u}(t)], \mathbf{v} \rangle$  із (2.2) остаточно характеризує пропозиція.

**Пропозиція 2.1** про розвинення нелінійного функціонала.

Нехай задані вектори  $\mathbf{f} = \{f_i(\mathbf{u})\}_{i=1}^p$  та  $\boldsymbol{\psi} = \{\psi_i(\mathbf{u})\}_{i=1}^p$  є настільки регулярними, що допускають розвинення за формулою Тейлора вигляду (2.3).

Тоді на кожному кроці інтегрування в часі значення функціонала (2.2) на напівдискретній апроксимації розв'язку  $\mathbf{u}_\Delta(t)$  з (2.1) обчислюють згідно з правилом

$$\begin{aligned} \langle N[\mathbf{u}_\Delta(t)], \mathbf{v} \rangle &= \langle N[\mathbf{u}^j + \Delta t \omega(t) \dot{\mathbf{u}}^{j+1/2}], \mathbf{v} \rangle \\ &= \langle N[\mathbf{u}^j], \mathbf{v} \rangle + \Delta t \omega(t) \mathfrak{R}(\mathbf{u}^j; \dot{\mathbf{u}}^{j+1/2}, \mathbf{v}) \\ &\quad + O(\Delta t^2) \quad \forall \mathbf{v} \in \mathbf{V} \quad \forall t \in [t_j, t_{j+1}], \end{aligned} \quad (2.7)$$

де лінійна складова має такий вигляд:

$$\mathfrak{R}(\mathbf{u}^j; \dot{\mathbf{u}}^{j+1/2}, \mathbf{v}) := \int_{\Omega} \dot{\mathbf{u}}^{j+1/2} \cdot \nabla_{\mathbf{u}}[\mathbf{f}(\mathbf{u}^j) \cdot \mathbf{v}] dx + \int_{\Gamma_q} \dot{\mathbf{u}}^{j+1/2} \cdot \nabla_{\mathbf{u}}[\boldsymbol{\psi}(\mathbf{u}^j) \cdot \mathbf{v}] d\gamma \quad \forall \mathbf{v} \in \mathbf{V}. \quad (2.8)$$

### 3.3 НАПІВДИСКРЕТИЗАЦІЯ ЗА ЧАСОВОЮ ЗМІННОЮ

Підставляючи апроксимацію  $\mathbf{u}_\Delta(t)$  із (2.1) у рівняння варіаційної задачі (1.5) та нехтуючи доданками порядку  $O(\Delta t^2)$  в розвиненні (2.7), ми одержимо лінеаризоване рівняння

$$\begin{aligned} m(\dot{\mathbf{u}}^{j+1/2}, \mathbf{v}) + B(\mathbf{u}^j, \mathbf{v}) + \Delta t \omega(t) B(\dot{\mathbf{u}}^{j+1/2}, \mathbf{v}) \\ = \langle N[\mathbf{u}^j], \mathbf{v} \rangle + \Delta t \omega(t) \mathfrak{R}(\mathbf{u}^j; \dot{\mathbf{u}}^{j+1/2}, \mathbf{v}) \quad \forall \mathbf{v} \in \mathbf{V} \quad \forall t \in [t_j, t_{j+1}]; \end{aligned} \quad (2.9)$$

домноживши його на функцію  $\zeta(t)$  з властивістю

$$\int_{t_j}^{t_{j+1}} \zeta(t) dt = 1$$

та, інтегруючи одержаний результат на проміжку часу  $[t_j, t_{j+1}]$ , приходимо до послідовності рекурентно розв'язуваних стаціонарних варіаційних задач

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{задано } \mathbf{u}^0 \in \mathbf{V}, \quad \Delta t > 0, \quad \theta \in [0, 1]; \\ \text{знайти } \dot{\mathbf{u}}^{j+1/2} \in \mathbf{V} \text{ та } \mathbf{u}^{j+1} \in \mathbf{V} \text{ такі, що} \\ m(\dot{\mathbf{u}}^{j+1/2}, \mathbf{v}) + \Delta t \theta [B(\dot{\mathbf{u}}^{j+1/2}, \mathbf{v}) - \mathfrak{R}(\mathbf{u}^j; \dot{\mathbf{u}}^{j+1/2}, \mathbf{v})] \\ \qquad \qquad \qquad = \langle N[\mathbf{u}^j], \mathbf{v} \rangle - B(\mathbf{u}^j, \mathbf{v}) \quad \forall \mathbf{v} \in \mathbf{V}, \\ \mathbf{u}^{j+1} = \mathbf{u}^j + \Delta t \dot{\mathbf{u}}^{j+1/2}, \quad j = 1, \dots, M-1. \end{array} \right. \quad (2.10)$$

Тут параметр  $\theta$  запроваджено з використанням теореми про інтегральне середнє таким способом:

$$\theta := \int_{t_j}^{t_{j+1}} \omega(t) \zeta(t) dt = \omega(\tau) \int_{t_j}^{t_{j+1}} \zeta(t) dt \cong \omega(\tau) \in [0, 1].$$

### 4. ДИСКРЕТИЗАЦІЯ ЗА ПРОСТОРОВИМИ ЗМІННИМИ

Поділимо область  $\Omega \subset R^d$  на скінченні елементи  $K$  так, щоб результуюча триангуляція

$$\mathfrak{T}_h = \{K\}, \quad h := \max_{K \in \mathfrak{T}_h} h_K, \quad h_K := \text{diam } K$$

мала властивості

$$\begin{aligned} \text{(i)} \quad & \bar{\Omega} = \bigcup_{K \in \mathfrak{T}_h} \bar{K}; \\ \text{(ii)} \quad & K \cap K' = \emptyset \quad \forall K, K' \in \mathfrak{T}_h : K \neq K'; \\ \text{(iii)} \quad & \bar{K} \cap \bar{K}' = \begin{cases} S := \{\text{спільна сторона } K \text{ та } K'\}, \\ A := \{\text{спільна вершина } K \text{ та } K'\}, \\ \emptyset \end{cases} \quad \forall K, K' \in \mathfrak{T}_h. \end{aligned} \quad (3.1)$$

#### 4.1. ПОВНІСТЮ ДИСКРЕТИЗОВАНА ЗАДАЧА ДИФУЗІЇ-РЕАКЦІЇ

Побудувавши певним способом (який буде окреслено пізніше) на триангуляції  $\mathfrak{T}_h = \{K\}$  скінченновимірний простір апроксимацій  $\mathbf{V}_h \subset \mathbf{V}$ ,  $\dim \mathbf{V}_h = N(h) = N < +\infty$ , ми, використовуючи підхід Гальоркіна, дискретизуємо задачу (2.10) перенесенням її розв'язування до цього підпростору

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{задано } \mathfrak{T}_h = \{K\} \text{ та } \mathbf{V}_h \subset V, \\ \dim \mathbf{V}_h = N(h) = N < +\infty, \\ \text{та } \mathbf{u}^0 \in \mathbf{V}_h, \quad \Delta t > 0, \quad \theta \in [0, 1]; \\ \text{знайти } \dot{\mathbf{u}}^{j+1/2} \in \mathbf{V}_h \text{ та } \mathbf{u}^{j+1} \in \mathbf{V}_h \text{ такі, що} \\ m(\dot{\mathbf{u}}_h^{j+1/2}, \mathbf{v}) + \Delta t \theta [B(\dot{\mathbf{u}}_h^{j+1/2}, \mathbf{v}) - \mathfrak{R}(\mathbf{u}_h^j; \dot{\mathbf{u}}_h^{j+1/2}, \mathbf{v})] \\ \qquad \qquad \qquad = \langle \Pi[\mathbf{u}_h^j], \mathbf{v} \rangle - B(\mathbf{u}_h^j, \mathbf{v}) \quad \forall \mathbf{v} \in \mathbf{V}_h. \\ \mathbf{u}^{j+1} = \mathbf{u}^j + \Delta t \dot{\mathbf{u}}^{j+1/2}, \quad j = 1, \dots, M-1. \end{array} \right. \quad (3.1.1)$$

Тепер, вибираючи зручний для обчислень базис  $\{\mathbf{v}_i(\mathbf{x})\}_{i=1}^N$  підпростору апроксимацій  $\mathbf{V}_h$ , ми конкретизуємо задачу (3.1.1) до алгебричного вигляду

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{задано } \mathfrak{T}_h = \{K\}, \text{ базис } \{\mathbf{v}_i(\mathbf{x})\}_{i=1}^N \text{ простору } \mathbf{V}_h \subset \mathbf{V}; \\ \text{та } \mathbf{u}_h^0(\mathbf{x}) := \sum_{m=1}^N q_m^0 \mathbf{v}_m(\mathbf{x}) \in \mathbf{V}_h, \quad \Delta t > 0, \quad \theta \in [0, 1]; \\ \text{знайти коефіцієнти } s_m \in R \text{ розвинення за базисом} \\ \dot{\mathbf{u}}_h^{j+1/2}(\mathbf{x}) := \sum_{m=1}^N s_m \mathbf{v}_m(\mathbf{x}) \\ \text{такі, що задовольняють систему лінійних алгебричних} \\ \text{рівнянь} \\ \sum_{m=1}^N \{m(\mathbf{v}_m, \mathbf{v}_i) + \Delta t \theta [B(\mathbf{v}_m, \mathbf{v}_i) - \mathfrak{R}(\mathbf{u}_h^j; \mathbf{v}_m, \mathbf{v}_i)]\} s_m \\ \qquad \qquad \qquad = \langle \Pi[\mathbf{u}_h^j], \mathbf{v}_i \rangle - B(\mathbf{u}_h^j, \mathbf{v}_i) = \langle l_{\Omega}, \mathbf{v}_i \rangle \quad i = 1, \dots, N \\ \text{та обчислити нові значення вектора концентрацій згідно з} \\ \text{правилом} \\ \mathbf{u}_h^{j+1}(\mathbf{x}) := \sum_{m=1}^N q_m^{j+1} \mathbf{v}_m(\mathbf{x}) = \sum_{m=1}^N (q_m^j + \Delta t s_m) \mathbf{v}_m(\mathbf{x}) \quad j = 0, 1, \dots. \end{array} \right. \quad (3.1.2)$$

4.2. КОНКРЕТИЗАЦІЯ АЛГОРИТМУ ОБЧИСЛЕННЯ СИСТЕМ РІВНЯНЬ  
 ПОВНІСТЮ ДИСКРЕТИЗОВАНОЇ ЗАДАЧІ ДИФУЗІЇ-РЕАКЦІЇ

Кожен елемент  $\mathbf{v}$  простору  $\mathbf{V}$  (відповідно й  $\mathbf{V}_h$ ) є вектором з  $p$  компонент

$$\mathbf{v} = \{v_i \in H^1(\Omega)\}_{i=1}^p,$$

зокрема, у вихідній задачі компонентами є кисень, чадний газ і рівень реконструкції поверхні, тобто  $p = 3$ . Отож, однакова гладкість усіх компонент дає змогу для їхньої апроксимації обмежитись єдиним набором функцій

$$\varphi_i = \varphi_i(\mathbf{x}), \text{ що } \varphi_i(\mathbf{x}^m) = \delta_{im} \quad \forall \mathbf{x}^m \in X_h, \quad (3.2.1)$$

де  $X_h$  множина вузлів триангуляції  $\mathfrak{T}_h$ ,  $X_h = \{\mathbf{x}^m\}_{m=1}^N$ , а  
 $N = N \cdot p$ .

Отож, із врахуванням структури  $\mathbf{V}_h$  на підставі функцій (3.2.1) побудуємо його базис, який з міркувань зручності реалізації чисельних алгоритмів складатиметься з векторів вигляду

$$\mathbf{v}_i^1(\mathbf{x}) := \mathbf{v}_{p(i-1)+1}(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} \varphi_i(\mathbf{x}) \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \dots, \mathbf{v}_i^p(\mathbf{x}) := \mathbf{v}_{p(i-1)+p}(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \varphi_i(\mathbf{x}) \end{pmatrix} \quad (3.2.2)$$

$i = 1, \dots, N.$

На такому базисі шукані вектори з простору  $\mathbf{V}_h$  подають у вигляді

$$\dot{\mathbf{u}}_h^{j+1/2} = \sum_{i=1}^N s_i \mathbf{v}_i(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^N \sum_{k=1}^p s_i^k \mathbf{v}_i^k(\mathbf{x}), \quad s_i^k \in R, \quad (3.2.3)$$

$$\mathbf{u}_h^j = \sum_{i=1}^N \sum_{k=1}^p q_i^k \mathbf{v}_i^k(\mathbf{x}), \quad q_i^k \in R.$$

Підстановка векторів (3.2.3) і векторів базису (3.2.2) у задачу (3.1.2) приводить до результуючої СЛАР, яку можна подати у такому матричному записі:

$$(\mathbf{M} + \Delta t \theta [\mathbf{B} - \mathbf{R}(\mathbf{u}_h^j)]) \mathbf{s} = \mathbf{\Pi}(\mathbf{u}_h^j) - \mathbf{Bq} \quad (3.2.4)$$

Система (3.2.4) складається з  $N \cdot p$  рівнянь, окремі компоненти якої обчислюють за формулами

$$\begin{aligned} m(\dot{\mathbf{u}}_h^{j+1/2}, \mathbf{v}_m^r) &= \int_{\Omega} (\rho \sum_{i=1}^N \sum_{k=1}^p s_i^k \mathbf{v}_i^k) \cdot \mathbf{v}_m^r dx = \sum_{i=1}^N \sum_{k=1}^p s_i^k \int_{\Omega} (\rho \mathbf{v}_i^k) \cdot \mathbf{v}_m^r dx \\ &= \sum_{i=1}^N \sum_{k=1}^p m(\mathbf{v}_i^k, \mathbf{v}_m^r) s_i^k = \sum_{i=1}^N \sum_{k=1}^p s_i^k \delta_{kr} \int_{\Omega} \rho_k \varphi_i \varphi_m dx \\ &= \sum_{i=1}^N s_i^r \int_{\Omega} \rho_r \varphi_i \varphi_m dx, \quad r = 1, \dots, p, \quad m = 1, \dots, N, \end{aligned} \quad (3.2.4)$$

оскільки

$$m(\mathbf{v}_i^k, \mathbf{v}_m^r) = \int_{\Omega} (\rho \mathbf{v}_i^k) \cdot \mathbf{v}_m^r dx = \delta_{kr} \int_{\Omega} \rho_k \varphi_i \varphi_m dx$$



$$\begin{aligned}
B(\dot{\mathbf{u}}_h^{j+1/2}, \mathbf{v}_m^r) &= \\
&= \int_{\Omega} [(\mu^r \nabla_{\mathbf{x}} \sum_{i=1}^N s_i^r \varphi_i) \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \varphi_m + (\sigma \sum_{i=1}^N \sum_{k=1}^p s_i^k \mathbf{v}_i^k) \cdot \mathbf{v}_m^r] dx \\
&= \sum_{i=1}^N s_i^r \int_{\Omega} [(\mu^r \nabla_{\mathbf{x}} \varphi_i) \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \varphi_m + (\sigma \mathbf{v}_i^r) \cdot \mathbf{v}_m^r] dx \\
&= \sum_{i=1}^N s_i^r \int_{\Omega} [(\mu^r \nabla_{\mathbf{x}} \varphi_i) \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \varphi_m + \sigma_r \varphi_i \varphi_m] dx,
\end{aligned} \tag{3.2.5}$$

аналогічно

$$B(\mathbf{u}_h^j, \mathbf{v}_m^r) = \sum_{i=1}^N q_i^r \int_{\Omega} [(\mu^r \nabla_{\mathbf{x}} \varphi_i) \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \varphi_m + \sigma_r \varphi_i \varphi_m] dx$$

$$\begin{aligned}
\Re(\mathbf{u}_h^j; \dot{\mathbf{u}}_h^{j+1/2}, \mathbf{v}_m^r) &= \\
&= \int_{\Omega} \dot{\mathbf{u}}_h^{j+1/2} \cdot \nabla_{\mathbf{u}} [\mathbf{f}(\mathbf{u}_h^j) \cdot \mathbf{v}_m^r] dx + \int_{\Gamma_q} \dot{\mathbf{u}}_h^{j+1/2} \cdot \nabla_{\mathbf{u}} [\boldsymbol{\psi}(\mathbf{u}_h^j) \cdot \mathbf{v}_m^r] d\gamma \\
&= \int_{\Omega} \left( \sum_{i=1}^N \sum_{k=1}^p s_i^k \mathbf{v}_i^k \right) \cdot \nabla_{\mathbf{u}} [f_r(\mathbf{u}_h^j) \varphi_m] dx + \int_{\Gamma_q} \left( \sum_{i=1}^N \sum_{k=1}^p s_i^k \mathbf{v}_i^k \right) \cdot \nabla_{\mathbf{u}} [\psi_r(\mathbf{u}_h^j) \varphi_m] d\gamma \\
&= \int_{\Omega} \sum_{i=1}^N \sum_{k=1}^p s_i^k \varphi_i \frac{\partial}{\partial u_k} f_r(\mathbf{u}_h^j) \varphi_m dx + \int_{\Gamma_q} \sum_{i=1}^N \sum_{k=1}^p s_i^k \varphi_i \frac{\partial}{\partial u_k} \psi_r(\mathbf{u}_h^j) \varphi_m d\gamma \\
&= \sum_{i=1}^N \sum_{k=1}^p s_i^k \left( \int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial u_k} f_r(\mathbf{u}_h^j) \varphi_i \varphi_m dx + \int_{\Gamma_q} \frac{\partial}{\partial u_k} \psi_r(\mathbf{u}_h^j) \varphi_i \varphi_m d\gamma \right)
\end{aligned} \tag{3.2.6}$$

$$\begin{aligned}
\langle \Pi[\mathbf{u}_h^j], \mathbf{v}_m^r \rangle &= \int_{\Omega} \mathbf{f}(\mathbf{u}_h^j) \cdot \mathbf{v}_m^r dx + \int_{\Gamma_q} \boldsymbol{\psi}(\mathbf{u}_h^j) \cdot \mathbf{v}_m^r d\gamma = \\
&= \int_{\Omega} f_r(\mathbf{u}_h^j) \varphi_m dx + \int_{\Gamma_q} \psi_r(\mathbf{u}_h^j) \varphi_m d\gamma
\end{aligned} \tag{3.2.7}$$

Перед формуванням СЛАР упорядкуємо шукані  $s_i^k$  та відомі з попереднього кроку за часом

$$q_i^k, \quad i = 1, \dots, N, \quad k = 1, \dots, p$$

коефіцієнти з розвинення (3.2.3) у вектори  $\mathbf{s}$  та  $\mathbf{q}$  відповідно, так:

$$\mathbf{s} = \begin{pmatrix} \mathbf{s}_1 \\ \vdots \\ \mathbf{s}_N \end{pmatrix}, \quad \mathbf{s}_i = \begin{pmatrix} s_i^1 \\ \vdots \\ s_i^p \end{pmatrix}, \quad \mathbf{q} = \begin{pmatrix} \mathbf{q}_1 \\ \vdots \\ \mathbf{q}_N \end{pmatrix}, \quad \mathbf{q}_i = \begin{pmatrix} q_i^1 \\ \vdots \\ q_i^p \end{pmatrix}. \tag{3.2.8}$$

Отож, використовуючи співвідношення (3.2.4)-(3.2.8), можемо записати (3.1.1) у матричному вигляді

$$(\mathbf{M} + \Delta t \theta [\mathbf{B} - \mathbf{R}(\mathbf{u}_h^j)]) \mathbf{s} = \Pi(\mathbf{u}_h^j) - \mathbf{B} \mathbf{q}, \tag{3.2.9}$$

де

$$\begin{aligned}
 \mathbf{M} &= \{\mathbf{M}_{im}\}_{i,m=1}^N, \quad \mathbf{M}_{im} = \left\{ \delta_{kr} \int_{\Omega} \rho_k \varphi_i \varphi_m dx \right\}_{k,r=1}^p, \\
 \mathbf{B} &= \{\mathbf{B}_{im}\}_{i,m=1}^N, \\
 \mathbf{B}_{im} &= \left\{ \delta_{kr} \int_{\Omega} [(\mu^r \nabla_x \varphi_i) \cdot \nabla_x \varphi_m + \sigma_k \varphi_i \varphi_m] dx \right\}_{k,r=1}^p, \\
 \mathbf{R}(\mathbf{u}_h^j) &= \{\mathbf{R}_{im}(\mathbf{u}_h^j)\}_{i,m=1}^N, \\
 \mathbf{R}_{im}(\mathbf{u}_h^j) &= \left\{ \int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial u_k} f_r(\mathbf{u}_h^j) \varphi_i \varphi_m dx + \int_{\Gamma_q} \frac{\partial}{\partial u_k} \psi_r(\mathbf{u}_h^j) \varphi_i \varphi_m d\gamma \right\}_{k,r=1}^p, \\
 \mathbf{\Pi}(\mathbf{u}_h^j) &= \{\mathbf{\Pi}_i(\mathbf{u}_h^j)\}_{i=1}^N, \\
 \mathbf{\Pi}_i(\mathbf{u}_h^j) &= \left\{ \int_{\Omega} f_r(\mathbf{u}_h^j) \varphi_i dx + \int_{\Gamma_q} \psi_r(\mathbf{u}_h^j) \varphi_i d\gamma \right\}_{r=1}^p.
 \end{aligned} \tag{3.2.10}$$

Просторова дискретизація (3.1) задачі, крім апроксимації шуканого розв'язку за його значеннями у вузлах сітки, передбачає також подання області  $\Omega$  у вигляді об'єднання скінчених елементів. Це дає змогу стандартним підходом МСЕ побудувати поелементну процедуру знаходження коефіцієнтів матриць (3.2.10) результуючої системи.

### 5. АПРОБАЦІЯ ЧИСЛОВИХ СХЕМ

Запропонована вище схема суміщення ітераційних процесів дискретизації вихідної задачі у часі та лінеаризації варіаційних рівнянь моделі ніяк не опирається на спосіб дискретизації її просторових змінних. Це дає змогу розраховувати, що для перевірки її ефективності достатньо обмежитися вибором одновимірної геометрії задачі. Навіть у цьому випадку складність вихідних співвідношень дає мало шансів на знаходження в явному вигляді бодай якогось часткового розв'язку, який був би придатним для оцінки достовірності та ефективності запропонованих чисельних схем. Тому, як це робиться стандартним способом, наперед задамося деяким зручним пробним розв'язком і підстановкою його в оператор моделі (1.5), отримаємо відповідну праву частину. Так прийдемо до нової задачі з уже відомим аналітичним розв'язком. Зрозуміло, що для збереження рівня складності вихідної моделі (1.1), (1.2) пробний розв'язок треба вибирати не будь-яким, а з умов дотримання ним таких вимог: 1) приводить до нелінійної (не нижче третього порядку) правої частини моделі, яка з міркувань фізичної адекватності повинна залишатися автономною; 2) права частина зв'язує рівняння моделі між собою; 3) поведінка компонент розв'язку у часі має коливний характер.

Зазначеним вище вимогам відповідає такий варіант розв'язку:

$$\mathbf{u}(x,t) = \left\{ \begin{aligned} a(x,t) &= \frac{1}{\cos(x+t)+2}; \\ n(x,t) &= \frac{a(x,t)}{b(x,t)}; \quad b(x,t) = \frac{1}{\sin(x+t)+2} \end{aligned} \right\}, \tag{4.1}$$

який приводить до задачі

$$\begin{cases} \frac{\partial a}{\partial t} - \nabla \cdot \nabla a = f_1(\mathbf{u}) := -8a^3 - a + bn^2(1 - 2n + 8bn), \\ \frac{\partial n}{\partial t} - \nabla \cdot \nabla n = f_2(\mathbf{u}) := -28a^3 + a^2 - 4bn^3 + 22a^3b^{-1}, \\ \frac{\partial b}{\partial t} - \nabla \cdot \nabla b = f_3(\mathbf{u}) := -8b^3 + 4b^2 - b + an^{-2}(-1 - 2n^{-1} + 8an^{-1}) \end{cases} \quad \text{в } \Omega \times (0, T]. \quad (4.2)$$

Складність моделі (4.2) нічим не поступається складності співвідношень (1.1), (1.2). На цій підставі будемо розраховувати, що порівняння її наближених розв'язків з точним (4.1) дасть змогу оцінити придатність застосованих нами чисельних схем.

Числовий аналіз моделі (4.2) розпочнемо з демонстрації просторового розподілу компонент її точного розв'язку (4.1) в області  $\Omega = [0, 2\pi]$ , наприклад, у момент часу  $t = 10$ , які зображено суцільними лініями на рис. 1.

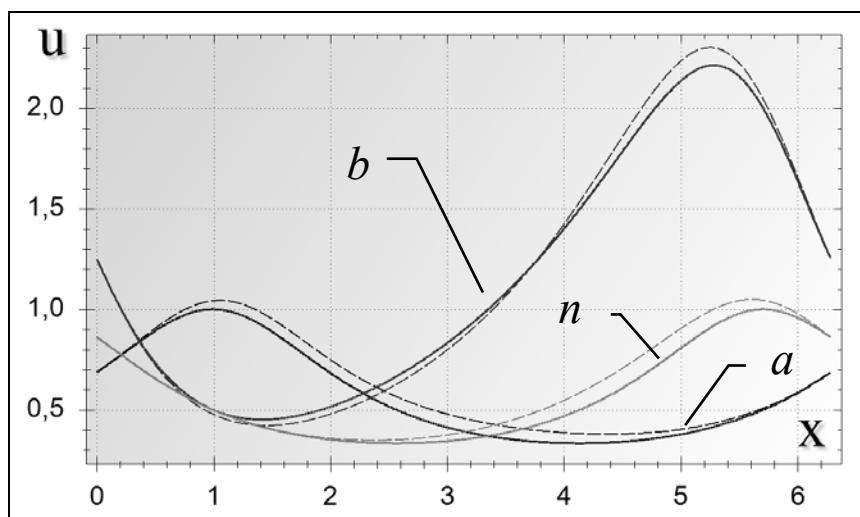


Рис. 1 Просторовий розподіл розв'язку задачі (4.2) при  $t=10$

Для порівняння пунктирними лініями тут же зображено числові результати, які отримали за побудованою вище методикою для сітки в 600 скінчених елементів і  $\Delta t = 10^{-4}$ . Як бачимо, за  $10^5$  кроків у часі наближений розв'язок досить добре повторює поведінку точного, що свідчить на користь принципової придатності використаних числових схем.

Для детальнішого аналізу точності отримуваних наближених розв'язків треба оцінювати порядки їхньої збіжності за параметрами просторової та часової дискретизації. Для цього послугуємоватимемось такими нормами:

$$\|u\|_{H^m(\Omega)}^2 = \|u\|_m^2 = \sum_{\alpha \leq m} \int_{\Omega} \left( \frac{\partial^\alpha u}{\partial x^\alpha} \right)^2 dx, \quad (4.3)$$

$$\|u\|_T^2 = \frac{1}{2} \|u(T)\|_{H^0(\Omega)}^2 + \int_0^T \|\nabla u(t)\|_{H^0(\Omega)}^2 dt, \quad (4.5)$$

$$\|\mathbf{u}\|_{V^m}^2 = \sum_{r=1}^p \|u_r\|_{H^m(\Omega)}^2, \quad (4.6)$$

$$\|\mathbf{u}\|_T^2 = \sum_{r=1}^p \|u_r\|_T^2. \quad (4.7)$$

Відповідно, порядки збіжності за часом і просторовою змінною обчислюватимемо за формулами

$$p_{\Delta t}^m(u) = \log_2 \frac{\|u_{\Delta t} - u_{\Delta t/2}\|_m}{\|u_{\Delta t/2} - u_{\Delta t/4}\|_m}, \quad p_{\Delta t}(u) = \log_2 \frac{\|u_{\Delta t} - u_{\Delta t/2}\|_T}{\|u_{\Delta t/2} - u_{\Delta t/4}\|_T} \quad (4.8)$$

$$p_{\Delta t}^m(\mathbf{u}) = \log_2 \frac{\|\mathbf{u}_{\Delta t} - \mathbf{u}_{\Delta t/2}\|_m}{\|\mathbf{u}_{\Delta t/2} - \mathbf{u}_{\Delta t/4}\|_m}, \quad p_{\Delta t}(\mathbf{u}) = \log_2 \frac{\|\mathbf{u}_{\Delta t} - \mathbf{u}_{\Delta t/2}\|_T}{\|\mathbf{u}_{\Delta t/2} - \mathbf{u}_{\Delta t/4}\|_T}$$

$$p_h^m(u) = \log_2 \frac{\|u_h - u_{h/2}\|_m}{\|u_{h/2} - u_{h/4}\|_m}, \quad p_h(u) = \log_2 \frac{\|u_h - u_{h/2}\|}{\|u_{h/2} - u_{h/4}\|}, \quad (4.9)$$

$$p_h^m(\mathbf{u}) = \log_2 \frac{\|\mathbf{u}_h - \mathbf{u}_{h/2}\|_m}{\|\mathbf{u}_{h/2} - \mathbf{u}_{h/4}\|_m}, \quad p_h(\mathbf{u}) = \log_2 \frac{\|\mathbf{u}_h - \mathbf{u}_{h/2}\|}{\|\mathbf{u}_{h/2} - \mathbf{u}_{h/4}\|}$$

Результати обчислення порядків швидкості збіжності для  $\Omega = [0, 2\pi]$  подано у таблиці нижче. Всі обчислення виконано на часовому проміжку  $[0, 10]$ .

### 5.1. ЗБІЖНІСТЬ ПРОСТОРОВИХ АПРОКСИМАЦІЙ

Для дослідження збіжності розв'язків задачі (4.2) використаємо послідовність рівномірних сіток з  $E, 2E, 4E, \dots$  скінчених елементів. Результати подаватимемо у момент часу  $t = 10$  за достатньо дрібного кроку інтегрування в часі  $\Delta t = 0.001$ .

Для аналізу збіжності використовуватимемо норми (4.3)-(4.7) та показники абсолютної й відносної похибок у цих нормах:

$$e_h^m(\mathbf{u}) := \|\mathbf{u}_h - \mathbf{u}_{h/2}\|_m \times 10^3, \quad \varepsilon_h^m(\mathbf{u}) = \frac{\|\mathbf{u}_h - \mathbf{u}_{h/2}\|_m}{\|\mathbf{u}_h\|_m} \times 100\%,$$

$$e_h(\mathbf{u}) := \|\mathbf{u}_h - \mathbf{u}_{h/2}\|_T \times 10^3, \quad \varepsilon_h(\mathbf{u}) = \frac{\|\mathbf{u}_h - \mathbf{u}_{h/2}\|_T}{\|\mathbf{u}_h\|_T} \times 100\% :$$

Таблиця 1

Збіжність просторових апроксимацій у нормах (4.3)-(4.7)

$E \times 10^{-2}$	$e_h^0(\mathbf{u})$	$e_h^1(\mathbf{u})$	$e_h(\mathbf{u})$	$p_h^0(\mathbf{u})$	$p_h^1(\mathbf{u})$	$p_h(\mathbf{u})$	$\varepsilon_h^0(\mathbf{u})$	$\varepsilon_h^1(\mathbf{u})$	$\varepsilon_h(\mathbf{u})$
1	-	-	-	-	-	-	-	-	-
2	1585	2243	2505	-	-	-	37,2	46,9	38,4
4	409	541	557	2,0	2,1	2,2	10,1	12,0	8,3
8	126	170	153	1,7	1,7	1,9	3,2	3,9	2,3
16	32	44	41	2,0	2,0	1,9	0,8	1,0	0,6
32	8	11	13	2,0	2,0	1,7	0,2	0,3	0,2

Результати підтверджують сподівання, що запропонована схема суміщення ітераційних процесів дискретизації вихідної задачі у часі та лінеаризації варіаційних рівнянь моделі не впливає на ефективність навіть простих просторових апроксимацій.

Застосування норми (4.5) дає змогу запобігти випадковому потраплянню у “зручний” для підтвердження попередніх висновків момент часу і відображає накопичення похибки просторової дискретизації за весь пройдений часовий період.

Незначне погіршення характеристик апроксимації на надгустих просторових сітках найімовірніше зумовлено початком впливу похибок часової дискретизації.

### 5.2. ЗБІЖНІСТЬ У ЧАСІ

Тепер за незмінної просторової сітки з  $N = 600$  елементів поспостерігаємо за збіжністю часової апроксимації розв’язку при зменшенні кроку інтегрування у часі вдвічі. Отримані показники збіжності у часі всіх  $(a, n, b)$  компонент розв’язку є досить близькими за величиною, тому подамо результати лише для першої з них.

У позначеннях

$$e_{\Delta t}^m(\mathbf{u}) := \|\mathbf{u}_h - \mathbf{u}_{h/2}\|_{\Delta t} \times 10^5,$$

$$\varepsilon_{\Delta t}^m(\mathbf{u}) = 10^3 \frac{\|\mathbf{u}_h - \mathbf{u}_{\Delta t/2}\|_m}{\|\mathbf{u}_{\Delta t}\|_m} \times 100\%,$$

$$e_{\Delta t}(\mathbf{u}) := \|\mathbf{u}_{\Delta t} - \mathbf{u}_{\Delta t/2}\|_T \times 10^3,$$

$$\varepsilon_{\Delta t}(\mathbf{u}) = 10 \frac{\|\mathbf{u}_{\Delta t} - \mathbf{u}_{\Delta t/2}\|_T}{\|\mathbf{u}_{\Delta t}\|_T} \times 100\%$$

отримано:

Таблиця 2

Збіжність у часі норм розв’язку

$\Delta t \times 10^{-5}$	$e_{\Delta t}^0(\mathbf{u})$	$e_{\Delta t}^1(\mathbf{u})$	$e_{\Delta t}(\mathbf{u})$	$p_{\Delta t}^0(\mathbf{u})$	$p_{\Delta t}^1(\mathbf{u})$	$p_{\Delta t}(\mathbf{u})$	$\varepsilon_{\Delta t}^0(\mathbf{u})$	$\varepsilon_{\Delta t}^1(\mathbf{u})$	$\varepsilon_{\Delta t}(\mathbf{u})$
5000	-	-	-	-	-	-	-	-	-
2500	267916	433076	4418	-	-	-	63375	91338	1465
1250	34546	46121	443	3,0	3,2	3,3	8578	10281	148
625	5728	7704	78	2,6	2,6	2,5	1435	1735	27
313	911	1226	27	2,7	2,7	1,5	229	277	9
156	161	217		2,5	2,5	1,0	40	49	5
78	32	43	7	2,3	2,3	1,0	8	10	2
39	7	9	3	2,2	2,2	1,0	2	2	1

Як і для просторової дискретизації застосування запропонованої методики попутної лінеаризації рівнянь моделі не зменшує ефективності використаної схеми часової апроксимації розв’язку.

### 6. ПРАКТИЧНІ РЕЗУЛЬТАТИ

Фізичні параметри реакції окиснення чадного газу на поверхні платини взято з досліджень у цьому напрямі, які проводять за участі одного з авторів цієї публікації в Інституті фізики конденсованих систем НАН України (м. Львів). Разом з додатковим (порівняно з моделлю (1.1)) врахуванням дифузії кисню вихідні дані задачі такі:

$$\begin{cases} \frac{\partial a}{\partial t} - \Delta a = f_1 = p_A(1-a)S_A - ad_A(n) - rB_S ab \\ \frac{\partial n}{\partial t} - \eta \Delta n = f_2 = n(1-n)a\theta(a-a_c^1) - \gamma n(1-a)^2 \\ \frac{\partial b}{\partial t} - 0.2\eta \Delta b = f_3 = p_B n(1-a-b)^2 \theta(1-b) - rA_S ab \end{cases} \quad (5.1)$$

$$\eta = 0.5 \cdot 10^{-2}, p_A = 1.47, p_B = 10.83,$$

$$S_A = S_A^0(1-n) + S_A^1 n, S_A^0 = 0.75, S_A^1 = 0.34,$$

$$d_A(n) = d_A^0(1-n) + d_A^1 n, d_A^0 = 1.92, d_A^1 = 0.05,$$

$$B_S = 0.6, A_S = 0.5, a_c^1 = 0.1, \gamma = 0.5, r = 0.042,$$

$$t \in [0, T], \Delta t = 0.1, \psi_i \equiv 0, i = \overline{1,3}.$$

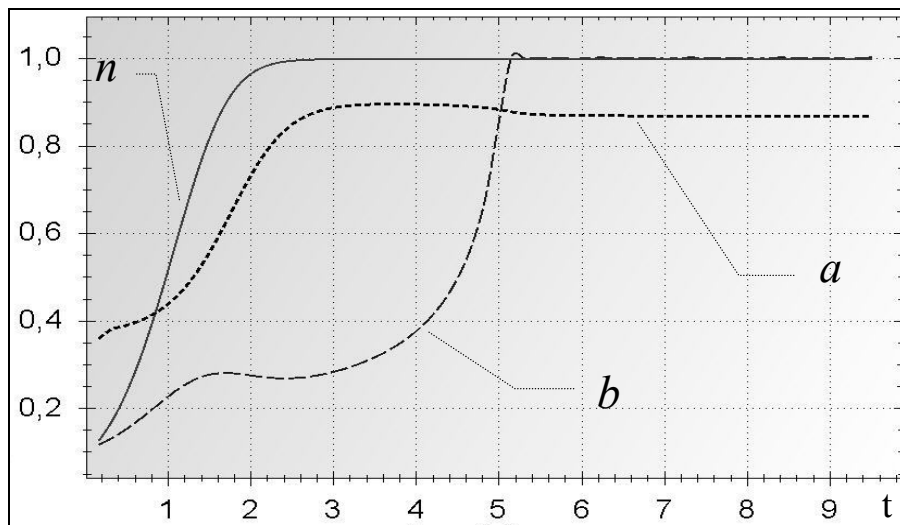


Рис. 2. Зміна у часі концентрацій чадного газу ( $a$ ), кисню ( $b$ ) та ступеня реконструкції поверхні платини ( $n$ )

Наведені значення параметрів тут нормалізовано відповідно до способу обезрозмірення змінних вихідної моделі. Зокрема, часова змінна  $t$  пов'язана з реальним часом проходження процесу  $t^*$  (сек.) так:

$$t^* = t / \gamma_{01}, \quad \partial_e \gamma_{01} = 10 e^{-1/\Theta} \quad (5.2)$$

за зв'язку між приведеною  $T$  і реальною  $T^*$  (К) температурами реакції

$$T = RT^*, \quad \text{де } R - \text{універсальна газова стала}, \quad (5.3)$$

та наведеною  $x$  і фізичною  $x^*$  ( $\mu\text{m}$ ) просторовими координатами

$$x^* = xL_A, \quad \text{де } L_A = \sqrt{B_s / \gamma_{01}}. \quad (5.4)$$

Обмежимося випадком початково рівномірного просторового розподілу реагентів, який через рівність нулю дифузійної складової рівнянь моделі залишатиметься рівномірним і в усі подальші моменти часу. Числове експериментування з вибраною моделлю виявило, що завершенням нетривалого перехідного процесу за типових для практики рівнів початкових концентрацій реагентів є налагодження стаціонарного режиму (рис. 2).

Домогтися виходу такої системи на автоколивний режим роботи, який простежується в реальних умовах, вдається лише за вибору фізично недосяжних значень окремих параметрів задачі. Це свідчить про суттєві вади моделі (5.1), відповідно, й необхідність подальшого її уточнення.

#### СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. Pavlenko N. CO-activator model for reconstructing Pt(100) surfaces: local microstructure and chemical turbulence. / N. Pavlenko // Phys. Rev. E 77, 026203(2008).
2. Вовк О.В. Проблеми застосування методу скінченних елементів до аналізу задач конвекції-дифузії-реакції / О.В. Вовк // СНКПМІ-2008: тези доп. XI Всеукр. (VI міжнар.) наук. конф. 9–10 квітня 2008 р., м. Львів. – Львів: Видавничий центр ЛНУ, 2008. – С. 56.
3. Вовк О.В. Чисельний аналіз моделі процесу окиснення чадного газу з реконструкцією поверхні Pt(100) / О.В. Вовк // СНКПМІ-2009: тези доп. XII Всеукр. (VII міжнар.) наук. конф. 28–29 квітня 2009 р., м. Львів. – Львів: Видавничий центр ЛНУ, 2009. – С. 58.
4. Гачкевич О. Числове розв'язування нелінійних задач перенесення зарядів у напівпровідникових структурах / О. Гачкевич, О. Смірнов, Г. Шинкаренко // Вісн. Львів. ун-ту. Сер. прикл. матем. та інформ. – 2005. – Вип. 10. – С. 98-110.
5. Куркина Е.С. Математическое моделирование автоколебаний скорости реакции окисления окиси углерода на металлических катализаторах / Е.С. Куркина, С.М. Макарова, М.М. Слинько // Математическое моделирование. Вычислительный эксперимент в науке и технике. – 1990. – Т. 2, N. 1. – С. 14-26.
6. Макеев А.Г. Автоколебания скорости гетерогенной каталитической реакции: сравнение стохастического и детерминистического подходов к моделированию / А.Г. Макеев, Н.Л. Семендяева // Математическое моделирование. Вычислительные алгоритмы и методы. – 1996. – Т. 8, N. 8. – С. 76-96.
7. Шинкаренко Г.А. Проекційно-сіткові методи розв'язування початково-крайових задач / Г.А. Шинкаренко. – К.: НМК ВО, 1991. – 88 с.

Стаття: надійшла до редколегії 10.10.2011

доопрацьована 10.11.2011

прийнята до друку 24.11.2011

**ПРОЕКЦИОННО-СЕТОЧНАЯ СХЕМА РЕШЕНИЯ ЭВОЛЮЦИОННЫХ  
ЗАДАЧ ОКИСЛЕНИЯ ОКИСИ УГЛЕРОДА НА ПОВЕРХНОСТИ ПЛАТИНЫ**

**О. Вовк<sup>\*</sup>, Г. Шинкаренко<sup>\*\*\*</sup>, Н. Павленко<sup>\*\*</sup>, В. Вовк<sup>\*</sup>**

<sup>\*</sup>Львовский национальный университет имени Ивана Франко,  
ул. Университетская, 1, Львов, 79000, e-mail: [kis@franko.lviv.ua](mailto:kis@franko.lviv.ua)

<sup>\*\*</sup>Институт физики конденсированных систем НАН Украины,  
ул. Свенцицкого, 1, Львов, 79011, e-mail: [icmp@icmp.lviv.ua](mailto:icmp@icmp.lviv.ua)

<sup>\*\*\*</sup>Политехника Опольская,  
вул. Любошицкая, 7, Ополье, Польша, e-mail: [iro@po.opole.pl](mailto:iro@po.opole.pl)

Численный анализ математических моделей широко используемых на практике процессов автокатализа в химических реакциях на поверхностях металлов значительно усложняется эволюционностью и нелинейностью исходных уравнений задачи. Дискретизация нескольких искомым функций (химические реагенты и характеристики поверхности) по времени и пространственным переменным, а также аппроксимация нелинейности приводят к затратному числовому экспериментированию.

Применено схему [4], которая с согласованием ошибок совмещает итерационные процессы дискретизации во времени и линеаризации вариационных уравнений модели. Это позволило с использованием конечно-элементных аппроксимаций построить и реализовать алгоритмы анализа прохождения трикомпонентной автокаталитической реакции окисления окиси углерода на поверхности платины [1].

*Ключевые слова:* дискретизация, линеаризация, МКЭ, автокатализ.

**PROJECTION GRID SCHEME OF CARBON MONOXIDE OXIDATION  
EVOLUTION MODELS SOLUTIONS ON PLATINUM SURFACES**

**O. Vovk<sup>\*</sup>, H. Shynkarenko<sup>\*\*\*</sup>, N. Pavlenko<sup>\*\*</sup>, V. Vovk<sup>\*</sup>**

<sup>\*</sup>Ivan Franko National University of Lviv,  
Universytetska str, 1, Lviv, 79000, e-mail: [kis@franko.lviv.ua](mailto:kis@franko.lviv.ua)

<sup>\*\*</sup>Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine,  
Svientsitski str, 1, Lviv, 79011, e-mail: [icmp@icmp.lviv.ua](mailto:icmp@icmp.lviv.ua)

<sup>\*\*\*</sup>Polytechnica Opolska, Luboshitska str, 7, Opole, Poland, e-mail: [iro@po.opole.pl](mailto:iro@po.opole.pl)

Numerical Analysis of mathematical models of catalic processes in chemical reactions on metal surfaces that are widely used on practice is significantly complicated by evolutionarity and nonlinearity in problem output relationships. Temporal and spatial discretization of several in question functions (chemical reactant, surface characteristics) as well as nonlinearity approximation leads to complicated numerical experimentation.

In this paper utilized scheme [4] that coincide iteration processes of time discretization and linearization of model variation equations with error adjustment. It allows build and realize algorithm for three component autocatalic carbon monoxide oxidation reaction analysis on platinum surface using finite elements approximations.

*Key words:* discretization, linearization, FEM, autocatalic.