Lietuvos matematikos rinkinys | ISSN 0132-2818
Lietuvos matematikų draugijos darbai, ser. B | www.mii.lt/LMR/
55 t., 2014, 1–6

Paviršinių reakcijų matematinio modelio tyrimas

Algirdas Ambrazevičius, Gintaras Puriuškis, Dovilas Bikus

Vilniaus Universitetas, Matematikos ir Informatikos Fakultetas
Naugarduko g. 24, LT-03225 Vilnius
E. paštas: algirdas.ambrazevicius@mif.vu.lt, gintaras.puriuskis@mif.vu.lt
E. paštas: dovilas.bikus@mif.stud.vu.lt

Santrauka. Darbe nagrinėjama susieta parabolinių ir paprastųjų diferencialinių lygčių sistema. Paprastosios diferencialinės lygtys nagrinėjamos srities paviršiaus dalyje. Gaunami šių lygčių sprendinių aprioriniai įverčiai. Ši sistema aprašo paviršinės reakcijos tarp anglies monoksido ir diazoto monoksido matemationį modelį.

Raktiniai žodžiai: parabolinės ir paprastosios diferencialinės lygtys, paviršinės reakcijos.

1 Įvadas

Diferencialinių lygčių teorijoje susietos parabolinių bei paprastųjų diferencialinų lygčių sistemos dažniausiai nagrinėjamos toje pačioje srityje (žr. [3, 5, 4] ir ten nurodytą literatūrą). Paviršinės reakcijos taip pat aprašomos susietomis parabolinių bei paprastųjų diferencialinų lygčių sistemomis. Kai kurios iš šių lygčių nagrinėjamos srities paviršiaus dalyje. Atvejai kai adsorbato difuzijos katalizatoriaus paviršiumi nepaisoma, o reagentas difunduoja link paviršiaus iš aprėžtos srities, produkto desorbcija nuo paviršiuas yra momentinė arba lėta, nagrinėjami darbuose [2, 1]. Šiuose darbuose įrodoma klasikinių sprendinių egzistavimo ir vienaties teoremos. Skaitiškai šie uždaviniai sprendžiami darbuose [6, 7].

Šiame darbe nagrinėsime bimolekulinės cheminės reakcijos tarp anglies monoksido ir diazoto monoksido matematinį modelį bei gausime šio modelio sprendinių apriorinius įverčius. Be to tarsime, kad produktų desorbcija nuo katalizatoriaus paviršiaus yra lėta.

2 Matematinis modelis

Darbe nagrinėjama reakcija tarp anglies monoksido ir diazoto monoksido: $\mathrm{CO} + \mathrm{N_2O} \to \mathrm{N_2} + \mathrm{CO_2}$. Pažymėkime $\mathrm{CO} = A_1$, $\mathrm{N_2O} = A_2$, $\mathrm{N_2} = B_1$ ir $\mathrm{CO_2} = B_2$. Yra žinoma, kad reakcijos eigą galima išskaidyti į tokius elementarius žingsnius:

$$A_1 + K \underset{\kappa_{11}}{\overset{\kappa_1}{\rightleftarrows}} A_1K, \qquad A_2 + K \underset{\kappa_{22}}{\overset{\kappa_2}{\rightleftarrows}} A_2K,$$
$$A_2K \overset{\kappa_{22}^*}{\to} B_1 + QK, \qquad A_1K + QK \overset{\kappa_{13}}{\to} B_2 + 2K,$$

čia A_1, A_2 yra reagentai, K yra katalizatorius, A_1K, A_2K yra reagentų A_1, A_2 adsorbatai, QK yra tarpinis produktas, B_1, B_2 yra reakcijos produktai. Dviguba rodyklė parodo, kad reakcija yra grįžtama, o κ_1, κ_2, κ_{11}, κ_{22}^*, κ_{22}, κ_{13} yra reakcijos greičių konstantos.

Tarkime reagentai A_1 ir A_2 užpildo sritį $\Omega \subset \mathbb{R}^n$, $n \geqslant 3$, funkcijos $a_1 = a_1(x,t)$ ir $a_2 = a_2(x,t)$ yra reagentų koncentracijas taške $x \in \Omega$ laiko momentu t, $S := \partial\Omega \subset C^{1+\alpha}$, $\alpha \in (0,1)$ yra $(n-1)$-matis paviršius, S_2 yra uždaras $(n-1)$-matis S poaibis (katalizatoriaus K paviršius), $S_1 = S \setminus S_2$; funkcija $\rho = \rho(\xi)$ yra adsorbcijos taškų koncentracija paviršiuje S taške $\xi \in S$, $\rho \in C(S)$, $\rho(\xi) \geqslant 0$ kiekvienam $\xi \in S$ ir $\rho(\xi) = 0$, kai $\xi \in S_1$; $\rho\theta_1$, $\rho\theta_2$ – reagentų A_1, A_2 adsorbatų koncentracijos; $\rho\theta_3$ – tarpinio produkto QK koncentracija; $\rho\theta_4$, $\rho\theta_5$ – nedesorbuotų produktų B_1, B_2 koncentracija; $\rho(1-\theta)$ – neužpildytų molekulėmis adsorbcijos taškų dalis srityje S_2; $\theta = \sum_{i=0}^{5}\theta_i$; $b_1 = b_1(x,t)$ $b_2 = b_2(x,t)$ – produktų B_1 B_2 koncentracijos taške $x \in \Omega$ laiko momentu t.

Nagrinėjame atvejį, kai reakcijos produktų B_1, B_2 desorbcija yra lėta. Todėl funkcijoms θ_i, $i = 1,\dots,5$ turime Koši uždavinį paprastųjų diferencialinių lygčių sistemai.

$$\begin{cases} \theta_1' = \kappa_1 a_1(1-\theta) - \kappa_{11}\theta_1 - \kappa_{13}\rho\theta_1\theta_3, & \theta_1|_{t=0} = \theta_{10},\ \xi \in S_2,\\ \theta_2' = \kappa_2 a_2(1-\theta) - \kappa_{22}\theta_2 - \kappa_{22}^*\theta_2, & \theta_2|_{t=0} = \theta_{20},\ \xi \in S_2,\\ \theta_3' = \kappa_{22}^*\theta_2 - \kappa_{13}\rho\theta_1\theta_3, & \theta_3|_{t=0} = \theta_{30},\ \xi \in S_2,\\ \theta_4' = \kappa_{22}^*\theta_2 - \kappa_4\theta_4, & \theta_4|_{t=0} = \theta_{40},\ \xi \in S_2,\\ \theta_5' = \kappa_{13}\rho\theta_1\theta_3 - \kappa_5\theta_5, & \theta_5|_{t=0} = \theta_{50},\ \xi \in S_2. \end{cases} \tag{1}$$

Reagentų A_1, A_2 difuzija aprašoma parabolinių lygčių sistema

$$\begin{cases} a_i' - k_i\Delta a_i = 0, & (x,t) \in \Omega \times (0,T),\\ k_i\dfrac{\partial a_i}{\partial \mathbf{n}} = 0, & (\xi,t) \in S_1 \times (0,T),\\ k_i\dfrac{\partial a_i}{\partial \mathbf{n}} + \kappa_i\rho a_i(1-\theta) = \kappa_{ii}\rho\theta_i, & (\xi,t) \in S_2 \times (0,T),\\ a_i|_{t=0} = a_{i0}, & (x,t) \in \overline{\Omega}, \end{cases} \quad i = 1,2. \tag{2}$$

Produktų B_1, B_2 difuzija aprašoma sistema

$$\begin{cases} b_i' - l_i\Delta b_i = 0, & (x,t) \in \Omega \times (0,T),\\ l_i\dfrac{\partial b_i}{\partial \mathbf{n}} = 0, & (\xi,t) \in S_1 \times (0,T),\\ l_i\dfrac{\partial b_i}{\partial \mathbf{n}} = \kappa_{i+3}\rho\theta_{i+3}, & (\xi,t) \in S_2 \times (0,T),\\ b_i|_{t=0} = b_{i0}, & (x,t) \in \overline{\Omega}, \end{cases} \quad i = 1,2, \tag{3}$$

čia $\theta_i' = \partial\theta_i/\partial t$, $\theta_{i0} = \theta_{i0}(\xi)$, $\xi \in S_2$ yra θ_i reikšmė pradinio laiko momentu $t = 0$, $i = 1,2,3,4,5$; Δ yra n-matis Laplaso operatorius; $\partial/\partial\mathbf{n}$ yra išorinė normalinė išvestinė paviršiui S; $a_i' = \partial a_i/\partial t$, $b_i' = \partial b_i/\partial t$, $a_{i0} = a_{i0}(x)$ ir $b_{i0} = b_{i0}(x)$ pradinės A_i ir B_i koncentracijos taške $x \in \overline{\Omega}$; κ_i, κ_{ii}, $i = 1,2$, κ_{13} ir κ_{22}^* yra adsorbcijos ir desorbcijos greičio konstantos; κ_4 ir κ_5 yra produktų B_1 ir B_2 desorbcijos greičio konstantos. Visos konstantos κ_1, κ_{11}, κ_{13}, κ_2, κ_{22}, κ_{22}^*, κ_4, κ_5, k_1, k_2, l_1, l_2 yra teigiamos.

Su bet kokiu tolydžių funkcijų θ_i, $i = 1,\dots,5$ rinkinių (3) uždavinys turi vienintelį klasikinį sprendinį. Todėl pakanka išnagrinėti (1)–(2) uždavinį.

3 Aprioriniai įverčiai

1 lema. *Tegu* $a_i = a_i(\xi, t)$, $i = 1, 2$ *yra tolydžios, neneigiamos funkcijos paviršiuje* $S_2 \times [0, T]$; $\theta_{i0} = \theta_{i0}(\xi)$, $i = 1, 2, 3, 4, 5$, *yra tolydžios ir neneigiamos funkcijos paviršiuje* S_2, $\sum_{i=1}^{5} \theta_{i0}(\xi) < 1$ *kiekvienam* $\xi \in S_2$; $\rho \in C(S)$, $\rho(\xi) \geqslant 0$ *kiekvienam* $\xi \in S$ *ir* $\rho(\xi) = 0$ *kiekvienam* $\xi \in S_1$. *Tegu* $\theta_i = \theta_i(\xi, t)$, $\xi \in S_2$, $t \in [0, T]$, $i = 1, 2, 3, 4, 5$, *yra Koši uždavinio* (1) *klasikinis sprendinys. Tada* $\theta_i(\xi, t) \geqslant 0$, $i = 1, 2, 3, 4, 5$ *ir* $\sum_{i=1}^{5} \theta_i(\xi, t) < 1$ *su kiekvienu* $\xi \in S_2$, $t \in [0, T]$.

Įrodymas. Tegu

$$\gamma = \bigl\{(\theta_1, \theta_2, \theta_3, \theta_4, \theta_5) \in \mathbb{R}^5 \colon \theta_i = \theta_i(\xi, t),\ i = 1, 2, 3, 4, 5,\ t \in [0, T]\bigr\}$$

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 nepalieka srities, apribotos plokštumomis $\theta = \sum_{j=1}^{5} \theta_j = 1$ ir $\theta_i = 0$, $i = 1, 2, 3, 4, 5$.

Tarkime priešingai, kad trajektorija γ kerta vieną iš plokštumų. Jeigu γ kerta plokštumą $\theta_1 = 0$ ir nekerta plokštumos $\theta = 1$, tai egzistuoja $t^* > 0$ ir $\varepsilon > 0$ tokie, kad $\theta_1(\xi, t) < 0$, kai $t \in (t^*, t^* + \varepsilon]$ ir $\theta(\xi, t) \leqslant 1$, kai $t \in [0, t^* + \varepsilon]$. Padauginę abi (1) sistemos pirmosios lygties puses iš $e^{\int_0^t \kappa_{11} + \kappa_{13}\rho\theta_3 d\tau}$ gauname reiškinį, kurį galime užrašyti taip:

$$\bigl(\theta_1 e^{\int_0^t \kappa_{11} + \kappa_{13}\rho\theta_3\, d\tau}\bigr)' = \kappa_1 a_1 (1 - \theta) e^{\int_0^t \kappa_{11} + \kappa_{13}\rho\theta_3\, d\tau}.$$

Suintegravę pagal kintamąjį t gauname:

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

Pagal prielaidą funkcijos a_1 ir θ_{10} yra neneigiamos. Todėl reiškinys dešinėje lygybės pusėje yra neneigiamas, o reiškinys kairėje lygties pusėje yra neigiamas, kai $t \in (t^*, t^* + \varepsilon]$. Gauta prieštara įrodo, kad trajektorija γ nekerta plokštumos $\theta_1 = 0$. Todėl $\theta_1(\xi, t) \geqslant 0$, $t \in [0, T]$. Analogiškai galima įrodyti, kad $\theta_2(\xi, t) \geqslant 0$, $t \in [0, T]$.

Tarkime egzistuoja laiko momentas $t^* > 0$, kuriuo trajektorija γ kerta plokštumą $\theta_3 = 0$. Tada egzistuoja $\varepsilon > 0$ toks, kad $\theta_3(\xi, t) < 0$, kai $t \in (t^*, t^* + \varepsilon)$. Padauginę abi (1) sistemos trečiosios lygties puses iš $e^{\int_0^t \kappa_{13}\rho\theta_1 d\tau}$ gauname reiškinį, kurį galime užrašyti taip:

$$\bigl(\theta_3 e^{\int_0^t \kappa_{13}\rho\theta_1 d\tau}\bigr)' = \kappa_{22}^* \theta_2 e^{\int_0^t \kappa_{13}\rho\theta_1 d\tau}.$$

Suintegravę pagal kintamąjį t gauname lygybę

$$\theta_3 e^{\int_0^t \kappa_{13}\rho\theta_1\, d\tau} = \theta_{30} + \int_0^t \kappa_{22}^* \theta_2 e^{\int_0^\tau \kappa_{13}\rho\theta_1\, ds} d\tau.$$

Kadangi $\theta_2(\xi, t) \geqslant 0$, tai reiškinys dešinėje šios lygties pusėje yra neneigiamas, o reiškinys kairėje lygties pusėje yra neigiamas, kai $t \in (t^*, t^* + \varepsilon]$. Gauta prieštara įrodo, kad trajektorija γ nekerta plokštumos $\theta_3 = 0$. Todėl $\theta_3(\xi, t) \geqslant 0$, $t \in [0, T]$. Pasinaudoję tuo, kad $\theta_1(\xi, t) \geqslant 0$, $\theta_2(\xi, t) \geqslant 0$, $\theta_3(\xi, t) \geqslant 0$, analogiškai galime įrodyti, kad $\theta_4(\xi, t) \geqslant 0$ ir $\theta_5(\xi, t) \geqslant 0$, $\forall t \in [0, T]$.

Jeigu trajektorija γ kerta plokštumą $\theta = 1$, tai egzistuoja $t^* > 0$ toks, kad $\theta(\xi, t^*) = 1$ ir $\theta_i(\xi, t) \geqslant 0$, $\forall t \in [0, t^*]$. Sudėję visas (1) sistemos lygtis gauname lygtį

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

Padauginę abi šios lygties puses iš $e^{\int_0^t (\kappa_1 a_1 + \kappa_2 a_2) ds}$ gausime reiškinį, kurį pertvarkome taip:

$$\begin{aligned} &-\big((1-\theta)e^{\int_0^t (\kappa_1 a_1 + \kappa_2 a_2)\, ds}\big)' \\ &\quad = \big(- \kappa_{11}\theta_1 - \kappa_{22}\theta_2 + \kappa_{22}^*\theta_2 - \kappa_4\theta_4 - \kappa_5\theta_5 - \kappa_{13}\rho\theta_1\theta_3\big)e^{\int_0^t (\kappa_1 a_1 + \kappa_2 a_2)\, ds}. \end{aligned}$$

Suintegravę pagal kintamąjį t gauname lygtį

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

Pagal prielaidą $1 - \theta_0(\xi) > 0$ ir $\kappa_{22} \geqslant \kappa_{22}^*$. Todėl reiškinys dešinėje šios lygties pusėje yra teigiamas $\forall t \in [0, t^*]$, o reiškinys kairėje lygtiės pusėje yra lygus 0, kai $t = t^*$. Gauta prieštara įrodo, kad trajektorija γ nekerta plokštumos $\theta = 1$. Taigi trajektorija γ nepalieka srities, apribotos plokštumomis $\theta = 1$ ir $\theta_i = 0$, $i = 1, 2, 3, 4, 5$. Lema įrodyta. $\square$

2 lema. *Tegu $\theta_i = \theta_i(\xi, t)$, $i = 1, 2, 3, 4, 5$ yra tolydžios, neneigiamos funkcijos paviršiuje $S_2 \times [0, T]$, tokios, kad $\sum_{i=1}^5 \theta_i(\xi, t) < 1$ kiekvienam $\xi \in S_2$, $t \in [0, T]$, $\rho \in C(S)$, $\rho(\xi) \geqslant 0$, kai $\xi \in S$ ir $\rho(\xi) = 0$, kai $\xi \in S_1$, $0 \leqslant a_{i0} \in C(\overline{\Omega})$, $i = 1, 2$. Tegu a_i, $i = 1, 2$ yra (2) uždavinio klasikinis sprendinys, o a_2 – (3) uždavinio klasikinis sprendinys. Tada su visais $x \in \overline{\Omega}$ ir $t \in [0, T]$ yra teisingos nelygybės*

$$0 \leqslant a_i(x, t) \leqslant \max\left\{ \max_{x \in \overline{\Omega}}\{a_{i0}(x)\}, \max_{\xi \in S_2, t \in [0,T]} \frac{\kappa_{ii}}{\kappa_i} \frac{\theta_i(\xi, t)}{1 - \theta(\xi, t)} \right\}, \quad i = 1, 2. \tag{4}$$

Įrodymas. Padauginę (2) lygtį iš dalimis glodžios funkcijos η ir suintegravę cilindru $Q_\tau = \Omega \times (0, \tau)$, $\tau \in (0, T]$, gausime tapatybę

$$\int\limits_{Q_\tau} a_1'\eta\, dx\, dt - k_1 \int\limits_{Q_\tau} \Delta a_1 \eta\, dx\, dt = 0.$$

Pritaikę integravimo dalimis formulę ją perrašome taip

$$\int_{Q_\tau} a_1'\eta\, dx\, dt - k_1 \int\limits_0^\tau \int\limits_S \frac{\partial a_1}{\partial n}\eta\, dS\, dt + k_1 \int_{Q_\tau} \sum_{i=1}^n \frac{\partial a_1}{\partial x_i}\frac{\partial \eta}{\partial x_i}\, dx\, dt = 0.$$

Pasinaudoję (2) kraštinėmis sąlygomis gauname

$$\int\limits_{Q_\tau} a_1'\eta\, dx\, dt + k_1 \int\limits_{Q_\tau} \sum_{i=1}^n \frac{\partial a_1}{\partial x_i}\frac{\partial \eta}{\partial x_i}\, dx\, dt = \int\limits_0^\tau \int_{S_2} (\kappa_1\rho(\theta - 1)a_1 + \kappa_{11}\rho\theta_1)\eta\, dS\, dt. \tag{5}$$

Tegu

$$\eta := a_1^-(x,t) = \begin{cases} a_1(x,t), & \text{kai } a_1(x,t) < 0,\\ 0, & \text{kai } a_1(x,t) \geqslant 0. \end{cases}$$

Įstatę taip apibrėžtą funkciją η į (5) gauname lygybę

$$\int\limits_{Q_\tau^-} a_1' a_1\,dx\,dt + k_1 \int\limits_{Q_\tau^-} \sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial a_1}{\partial x_i}\right)^2 dx\,dt = \int\limits_0^\tau \int\limits_{S_2} \bigl(\kappa_1\rho(\theta-1)a_1 + \kappa_{11}\rho\theta_1\bigr)a_1^-\,dS\,dt, \tag{6}$$

kur $Q_\tau^- := \{(x,t) \in Q_\tau\colon a_1(x,t) < 0\}$. Kadangi $(\kappa_1\rho(\theta-1)a_1 + \kappa_{11}\rho\theta_1)a_1^- \leqslant 0$, tai integralas dešinėje (6) lygybės pusėje yra neteigiamas. Be to

$$\int\limits_{Q_\tau^-} a_1' a_1\,dx\,dt = \frac{1}{2}\int\limits_{Q_\tau^-} \frac{\partial}{\partial t} a_1^2\,dx\,dt = \frac{1}{2}\int\limits_{\Omega} (a_1^-)^2\,dx\Big|_{t=0}^{t=\tau} = \frac{1}{2}\int\limits_{\Omega} (a_1^-)^2\,dx\Big|^{t=\tau} \geqslant 0$$

Todėl (6) lygybė yra galima tik tuo atveju, kai $a_1(x,t) \geqslant 0$, $\forall x \in \overline{\Omega}$, $t \in [0,T]$.

Tegu (5) tapatybėje

$$\eta := \bigl(a_1(x,t) - r\bigr)^+ = \begin{cases} a_1(x,t) - r, & \text{kai } a_1(x,t) > r,\\ 0, & \text{kai } a_1(x,t) \leqslant r. \end{cases}$$

Tada pasinaudoję (2) kraštinėmis sąlygomis gauname

$$\begin{aligned} &\int_{Q_\tau^r} a_1'(a_1 - r)\,dx\,dt + k_1 \int_{Q_\tau^r} \sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial a_1}{\partial x_i}\right)^2 dx\,dt \\ &\quad = \int_0^\tau \int_{S_2} \bigl(\kappa_1\rho(\theta-1)a_1 + \kappa_{11}\rho\theta_1\bigr)(a_1 - r)^+\,dS\,dt, \end{aligned} \tag{7}$$

kur $Q_\tau^r := \{(x,t) \in Q_\tau\colon a_1(x,t) > r\}$. Kai

$$r \geqslant \frac{\kappa_{11}}{\kappa_1} \max_{\xi \in S_2, t \in [0,T]} \frac{\theta_1(\xi,t)}{1 - \theta(\xi,t)},$$

reiškinys $\kappa_1\rho(\theta-1)a_1 + \kappa_{11}\rho\theta_1 \leqslant 0$. Todėl integralas dešinėje (7) lygybės pusėje yra neteigiamas. Tegu $r \geqslant \max_{x\in\overline{\Omega}}\{a_{10}(x)\}$. Tada

$$\int_{Q_\tau^r} a_1'(a_1 - r)\,dx\,dt = \frac{1}{2}\int\limits_{Q_\tau^r} \frac{\partial}{\partial t}(a_1 - r)^2\,dx\,dt = \frac{1}{2}\int_{\Omega} (a_1 - r)^{+2}\,dx\Big|^{t=\tau} \geqslant 0.$$

Todėl kai

$$r \geqslant \max\left\{ \max_{x\in\overline{\Omega}}\{a_{10}(x)\}, \max_{\xi \in S_2, t \in [0,T]} \frac{\kappa_{11}}{\kappa_1} \frac{\theta_1(\xi,t)}{1 - \theta(\xi,t)} \right\},$$

$\forall x \in \overline{\Omega}$, $t \in [0,T]$, (7) lygybė teisinga tik tuo atveju, kai aibė Q_τ^r yra tuščia. Taigi

$$a_1(x,t) \leqslant \max\left\{ \max_{x\in\overline{\Omega}}\bigl\{a_{10}(x)\bigr\}, \max_{\xi \in S_2,\, t \in [0,T]} \frac{\kappa_{11}}{\kappa_1} \frac{\theta_1(\xi,t)}{1 - \theta(\xi,t)} \right\},$$

$\forall x \in \overline{\Omega}$, $t \in [0,T]$. Analogiškai įrodoma, kad $a_2(x,t) \geqslant 0$ ir

$$a_2(x,t) \leqslant \max\left\{\max_{x\in\overline{\Omega}}\{a_{20}(x)\},\ \max_{\xi\in S_2,\, t\in[0,T]} \frac{\kappa_{22}}{\kappa_2}\frac{\theta_2(\xi,t)}{1-\theta(\xi,t)}\right\},$$

$\forall x \in \overline{\Omega}$, $t \in [0,T]$. Lema įrodyta. $\square$

3 lema. *Tarkime yra patenkintos* (2) *lemos sąlygos. Tada su visais* $x \in \overline{\Omega}$, $t \in [0,T]$ *yra teisinga nelygybė*

$$\begin{aligned}
&\kappa_1 a_1(x,t) + \kappa_2 a_2(x,t)\\
&\quad\leqslant \max\left\{\max_{x\in\overline{\Omega}}\{\kappa_1 a_{10}(x) + \kappa_2 a_{20}(x)\},\ \frac{1}{q}\max_{\xi\in S_2,\, t\in[0,T]}\left\{\frac{\frac{\kappa_1}{k_1}\kappa_{11}\theta_1(\xi,t) + \frac{\kappa_2}{k_2}\kappa_{22}\theta_2(\xi,t)}{1-\theta(\xi,t)}\right\}\right\},\\
&\quad q = \min\left\{\frac{\kappa_1}{k_1}, \frac{\kappa_2}{k_2}\right\}.
\end{aligned}\tag{8}$$

Šios lemos įrodymas yra analogiškas 2 lemos įrodymui,

Literatūra

[1] A. Ambrazevičius. Existence and uniqueness theorem to a unimolecular heterogeneous catalytic reaction model. *Nonlinear Anal. Model. Control*, **15**(4):405–421, 2010.

[2] A. Ambrazevičius. Solvability of a coupled system of parabolic and ordinary differential equations. *Centr. Eur. J. Math.*, **8**(3):537–547, 2010.

[3] C.V. Pao. *Nonlinear Parabolic and Elliptic Equations*. Plenum Press, New York, 1992.

[4] C.V. Pao and W.H. Ruan. Positive solutions of quasilinear parabolic systems with nonlinear boundary conditions. *J. Math. Anal. Appl.*, **333**(1):472–499, 2007.

[5] C.V. Pao and W.H. Ruan. Positive solutions of quasilinear parabolic systems with dirichlet boundary condition. *J. Diff. Eq.*, **248**(5):1175–1211, 2010.

[6] V. Skakauskas and P. Katauskis. Numerical solving of coupled systems of parabolic and ordinary differential equations. *Nonlinear Anal. Model. Control*, **15**(3):351–360, 2010.

[7] V. Skakauskas and P. Katauskis. Numerical study of the kinetics of unimolecular heterogeneous reactions onto planar surfaces. *J. Math. Chem.*, **50**(1):141–154, 2012.

SUMMARY

The study of a mathematical model of surface reactions

A. Ambrazevičius, G. Puriuškis, D. Bikus

We prove the a priori estimates of a classical solution to a coupled system of parabolic and ordinary differential equations, the latter being determined on the boundary of the domain. This system describes the model of surface reactions between carbon monoxide and nitrous oxide.

Keywords: parabolic and ordinary differential equations, surface reactions.