

Parabolinio tipo lygčių su nelokalėmis kraštinėmis sąlygomis sprendinių kokybinė analizė

Jurij Novickij, Feliksas Ivanauskas

Vilniaus Universitetas, Matematikos ir informatikos fakultetas

Naugarduko g. 24, LT-03225 Vilnius

E. paštas: jurij.novickij@gmail.com; feliksas.ivanauskas@mif.vu.lt

Santrauka. Šio straipsnio tikslas – parabolinio tipo lygčių su nelokalėmis kraštinėmis sąlygomis sprendinių neneigiamumo ir fizinių parametrų tyrimas. Buvo išnagrinėtos difuzijos ir difuzijos–konvekcijos lygtys. Siekiant optimizuoti tam tikrus fizinius parametrus, buvo parinkti labiausiai tinkami svoriai. Apskaičiuota srovė, maksimalus srovės gradientas, jautrumas ir reakcijos laikas. Nagrinėtų svorių aibėje kiekvienam parametru rastas optimizuojantis svoris.

Raktiniai žodžiai: difuzijos lygtis, difuzijos–konvekcijos lygtis, nelokalios sąlygos, baigtinių skirtumų metodas.

Įvadas

Diferencialinių lygčių uždaviniai su nelokalėmis sąlygomis sprendžiami įvairiose biologijos, chemijos, biochemijos, mechanikos, fizikos srityse. Nelokalios integralinės sąlygos naudojamos dalelių difuzijos turbulentinėje plazmoje, šilumos sklaidimo ploname įkaitintame strype ir kituose uždaviniuose [3]. Straipsnyje nagrinėjama III tipo nelokalė kraštinė sąlyga su integraliniu nariu

$$U(0, t) - \sigma_0 \frac{\partial U(0, t)}{\partial x} = \gamma_0 \int_0^1 K(x) U(x, t) dx, \quad t > 0,$$

čia $\gamma_0 \geq 0$, $\sigma_0 \geq 0$ – duotos konstantos, $K(x)$ – svorio funkcija.

Gautų rezultatų skaitiniai modeliai gali būti naudojami sprendžiant vienmačius šio tipo uždavinius fizikos, chemijos, biochemijos mokslo srityse.

1 Uždavinio formulavimas

Nagrinėsime difuzijos–konvekcijos lygtį

$$\frac{\partial U(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 U(x, t)}{\partial x^2} - V \frac{\partial U(x, t)}{\partial x}, \quad 0 < x < 1, \quad 0 < t \leq T, \quad (1)$$

pradinę sąlygą

$$U(x, 0) = \begin{cases} 0, & 0 \leq x < 1, \\ S_0, & x = 1, \end{cases} \quad (2)$$

III tipo nelokalią kraštinę sąlygą su integraliniu nariu

$$U(0, t) - \sigma_0 \frac{\partial U(0, t)}{\partial x} = \gamma_0 \int_0^1 K(x)U(x, t) dx, \quad 0 < t \leq T \tag{3}$$

ir klasikinę kraštinę sąlygą

$$U(1, t) = S_0, \quad 0 < t \leq T, \tag{4}$$

čia D – difuzijos koeficientas, V – greitis, $S_0 \geq 0$ – substrato koncentracija.

Atskiru atveju, kai $V = 0$, turime difuzijos lygtį

$$\frac{\partial U(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 U(x, t)}{\partial x^2}, \quad 0 < x < 1, \quad 0 < t \leq T. \tag{5}$$

Uždavinius (1)–(4) ir (2)–(5) diskretizuojame neišreikštine skirtumine schema

$$A_i[S^{j+1}] \equiv \begin{cases} \frac{S_i^{j+1} - S_i^j}{\tau} = D \frac{S_{i-1}^{j+1} - 2S_i^{j+1} + S_{i+1}^{j+1}}{h^2} - V \frac{S_i^{j+1} - S_{i-1}^{j+1}}{h}, & \text{kai } V \geq 0, \\ \frac{S_i^{j+1} - S_i^j}{\tau} = D \frac{S_{i-1}^{j+1} - 2S_i^{j+1} + S_{i+1}^{j+1}}{h^2} - V \frac{S_{i+1}^{j+1} - S_i^{j+1}}{h}, & \text{kai } V < 0, \end{cases} \tag{6}$$

$$A_0[S^{j+1}] \equiv S_0^{j+1} - \sigma_0 \frac{S_1^{j+1} - S_0^{j+1}}{h} = \gamma_0 h \left(\frac{K(0)S_0^{j+1} + K(1)S_N^{j+1}}{2} + \sum_{i=1}^{N-1} K(x_i)S_i^{j+1} \right), \tag{7}$$

$$A_N[S^{j+1}] \equiv S_N^{j+1} = S_0, \tag{8}$$

$$S_i^0 = \begin{cases} 0, & i \in [0, N[, \\ S_0, & i = N, \end{cases} \quad i = \overline{1, N-1}, \quad j = \overline{0, M-1}. \tag{9}$$

Gautą tiesinių algebrinių lygčių sistemą sprendžiame perkelties metodo pagalba.

2 Sprendinio neneigiamumas

1 teorema. *Difuzijos–konvekcijos (1)–(4) bei difuzijos (2)–(5) uždavinių skaitinis sprendinys, apskaičiuotas (6)–(9) neišreikštinės schemos pagalba, yra neneigiamas, jei*

$$\text{a) } \gamma_0 \in \left[0, \frac{2(h + \sigma_0)}{h^2 K(0)} \right], \quad \text{b) } K(x) \geq 0, \quad \text{c) } \int_0^1 K(x) dx \leq \rho < 1. \tag{10}$$

Irodymas. (6)–(9) uždavinio atitinkančios matricos

$$\begin{pmatrix} C_0 & -l_1 & -a_2 & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & -a_N \\ -A & C & -B & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & \dots & 0 & -A & C & -B & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 & -A & C & -B \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 & S_0 \end{pmatrix} \tag{11}$$

koeficientai:

$$C_0 = 1 + \frac{\sigma_0}{h} - \frac{\gamma_0 h K(0)}{2}, \quad l_1 = \frac{\sigma_0}{h} + \gamma_0 h K(x_1),$$

$$a_i = \gamma_0 h K(x_i), \quad a_N = \frac{1}{2} \gamma_0 h K(1),$$

$$A = \frac{\tau D}{h^2} + \frac{\tau V}{h}, \quad C = \frac{2\tau D}{h^2} + \frac{\tau V}{h} + 1, \quad B = \frac{\tau D}{h^2}, \quad \text{kai } V \geq 0,$$

$$A = \frac{\tau D}{h^2}, \quad C = \frac{2\tau D}{h^2} - \frac{\tau V}{h} + 1, \quad B = \frac{\tau D}{h^2} - \frac{\tau V}{h}, \quad \text{kai } V < 0.$$

Patikrinsime, kad (11) matrica tenkina apibendrinto maksimumo principo [3] sąlygas:

1. Įstrižainės elementai yra teigiami;
2. Visi neįstrižainės elementai yra neteigiami;
3. Matrica yra silpnai diagonaliai vyraujanti;
4. $A_i[y] \geq 0, i = 0, \dots, N$.

Kadangi

$$C_0 > 0 \Leftrightarrow \gamma_0 \in \left[0, \frac{2(h + \sigma_0)}{h^2 K(0)} \right], \quad C > 0,$$

tai pirmoji matricos savybė yra tenkinama.

Neįstrižainės elementų neteigiamumas akivaizdus, todėl antroji matricos savybė yra tenkinama. Iš (10.c) sąlygos matome, kad visada galima rasti tokį skaičių $\hat{h}_0 = \frac{h_0}{\gamma_0}$, kad su visomis $h < \hat{h}_0$ reikšmėmis yra teisinga nelygybė

$$A_0[1] \equiv \gamma_0 h \left(\frac{K(0) + K(1)}{2} + \sum_{i=1}^{N-1} K(x_i) \right) < 1, \quad (12)$$

todėl

$$1 - \frac{\gamma_0 h K(0)}{2} > \frac{\gamma_0 h K(1)}{2} + \gamma_0 h \sum_{i=1}^{N-1} K(x_i). \quad (13)$$

Panaudojus (13) sąlyga tikriname (11) matricos pirmą eilutę. Tada:

$$1 - \frac{\gamma_0 h K(0)}{2} + \frac{2\sigma_0}{h} - \frac{2\sigma_0}{h} > \frac{\gamma_0 h K(1)}{2} + \gamma_0 h \sum_{i=1}^{N-1} K(x_i). \quad (14)$$

Tikrindami (11) matricos likusias eilutes, gauname

$$C - A - B = 1 > 0. \quad (15)$$

Iš (14), (15) seka, kad (11) matrica yra diagonaliai vyraujanti, todėl ir silpnai diagonaliai vyraujanti. Kadangi

$$A_0[S^{j+1}] \equiv 0, \quad A_i[S^{j+1}] \equiv S_i^j \geq 0, \quad (16)$$

$$A_N[S^{j+1}] \equiv S_0 \geq 0, \quad \text{kai } j = \overline{0, M-1},$$

tai yra tenkinama 4 sąlyga.

Taigi visos apibendrinto maksimumo principo sąlygos yra išpildytos, todėl S_i^{j+1} negali įgyti mažiausios neigiamos reikšmės nei viename taške $i = \overline{0, N}$, kai $j = \overline{0, M-1}$.

1 pastaba.

1. Kai $V = 0$, teoremos tvirtinimas teisingas difuzijos lygčiai;
2. Kai (10.a) formulėje $K(0) = 0$, ji keičiama sąlyga $\gamma_0 \in \mathbb{R}^+$;
3. Kai $\gamma_0 = 0$, (3) kraštinė sąlyga yra III tipo ir jai galioja specialus maksimumo principas [2].

3 Fiziniai parametrai

Bedimensine srove [1] vadiname dydį

$$i(t) = D \frac{\partial U(x, t)}{\partial x} \Big|_{x=0}. \quad (17)$$

Nusistovėjusi srovė yra

$$I = \lim_{t \rightarrow \infty} i(t).$$

Bedimensinis dydis, vadinamas substrato koncentracijos jautrumu [1], yra apibrėžiamas kaip nusistovėjusios srovės gradientas, atsižvelgiant į substrato koncentraciją

$$B_S(S_0) = \frac{S_0}{I(S_0)} \times \frac{dI(S_0)}{dS_0}. \quad (18)$$

Maksimalus srovės gradientas [1], apskaičiuotas laiko atžvilgiu, apibrėžiamas formule

$$B_G = \max_{i(t) > 0} \left\{ \frac{t}{i(t)} \times \frac{di(t)}{dt} \right\}. \quad (19)$$

Kadangi įvairių prietaisų difuzijos srovės ir darbo laikas gali labai skirtis, šita bedimensinė charakteristika plačiai naudojama trumpalaikės darbo būklės prietaisų palyginimui.

Prietaisų, kurie veikia stacionariai, reakcijos laikas [1] yra momentas, kai srovės absoliutinė nuokrypio reikšmė mažėja iki fiksuoto mažo skaičiaus. Jis žymimas

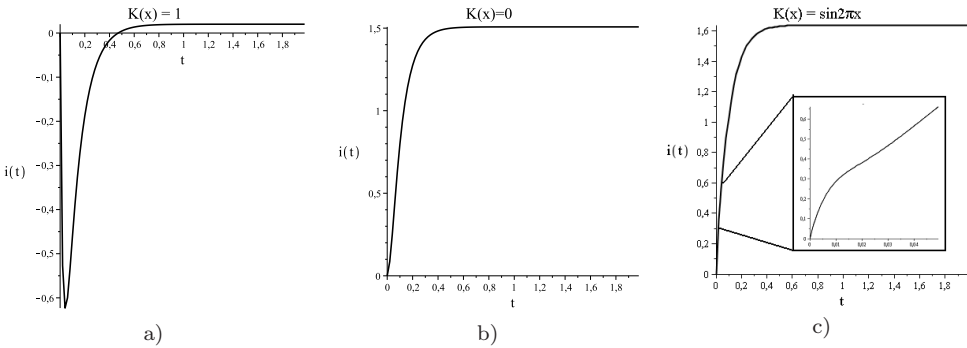
$$T = \max_{i(t) > 0} \left\{ t: \frac{t}{i(t)} \times \left| \frac{di(t)}{dt} \right| < \varepsilon \right\}. \quad (20)$$

Skaičiavimams pakanka imti $\varepsilon = 10^{-2}$.

Prietaisų trumpalaikės darbo būklės atveju, laikas, kai išvestinė $i(t)$ yra maksimali, vadinamas reakcijos laiku [1]. Jis žymimas

$$T_G = \left\{ t: \frac{t}{i(t)} \times \frac{di(t)}{dt} = B_G \right\}. \quad (21)$$

Tai yra momentas, kuriuo pasiekiamas maksimalus srovės gradientas B_G .



1 pav. Difuzijos lygties srovės.

4 Skaitinis modeliavimas

Uždaviniai buvo modeliuojami¹ su idealizuotais svoriais:

$$K(x) = 1, \quad K(x) = x, \quad K(x) = \sin(2\pi x), \quad K(x) = \cos(2\pi x),$$

$$K(x) = e^x - 1, \quad K(x) = \sin(\pi x), \quad K(x) = \cos\left(\frac{\pi x}{2}\right).$$

Svoriai $K(x) = \sin(2\pi x)$, $K(x) = \cos(2\pi x)$ netenkina (10.b) sąlygos, todėl tinka ne visų tipų uždaviniams.

Srovių grafikus, apibrėžtų (17) formule, matome 1 pav.

Substrato koncentracijos jautrumas (18) apskaičiuotas 1 lentelėje.²

1 lentelė. Difuzijos bei difuzijos–konvekcijos lygties substrato koncentracijos jautrumas.

$K(x)$	1	x	$\sin(2\pi x)$	$\cos(2\pi x)$	$e^x - 1$	$\sin(\pi x)$	$\cos(\frac{\pi x}{2})$
$B_s(S_0)$	1.00	0.99	1.00	0.99	0.99	1.00	1.00
$B_s(S_0)$	0.99	1.00	1.00	1.00	0.99	1.00	1.00

2 lentelėje yra apskaičiuotas maksimalus srovės gradientas (19), kai $T = 0.1$ s, $\tau = 0.001$ s.

2 lentelė. Difuzijos bei dif.–konv. lygties maksimalus srovės gradientas.

$K(x)$	1	x	$\sin(2\pi x)$	$\cos(2\pi x)$	$e^x - 1$	$\sin(\pi x)$	$\cos(\frac{\pi x}{2})$
B_G	–	35.23	1.447	18.41	40.37	30.64	42.87
B_G	–	55.35	1.396	27.71	–	46.40	59.38

Stacionariai veikiančių prietaisų reakcijos laikas (20) apskaičiuotas 3 lentelėje.

Trumpalaikės darbo būklės prietaisų, reakcijos laikas (21), kai $T = 0.1$ s, $\tau = 0.001$ s, apskaičiuotas 4 lentelėje.

¹ Straipsnyje, jeigu nenurodyta kitaip: $h = 0.01$ mm, $\tau = 0.02$, $T = 2$, $S_0 = 1$ mM, $D = 3$ mm²/s, $\gamma_0 = 1$, $\sigma_0 = 1$, $V = -10$ mm/s.

² Visose lentelėse: antra eilutė – difuzijos, trečia eilutė – difuzijos–konvekcijos procesas.

3 lentelė. Difuzijos ir difuzijos–konvekcijos proceso reakcijos laikas.

$K(x)$	1	x	$\sin(2\pi x)$	$\cos(2\pi x)$	$e^x - 1$	$\sin(\pi x)$	$\cos(\frac{\pi x}{2})$
$T(\%)$	31%	21%	19%	20%	23%	<u>5%</u>	<u>5%</u>
$T(\%)$	66%	22%	33%	32%	43%	<u>7%</u>	<u>6%</u>

4 lentelė. Difuzijos bei difuzijos–konvekcijos proceso reakcijos laikas.

$K(x)$	1	x	$\sin(2\pi x)$	$\cos(2\pi x)$	$e^x - 1$	$\sin(\pi x)$	$\cos(\frac{\pi x}{2})$
$T_G(\%)$	–	50%	<u>3%</u>	22%	73%	55%	46%
$T_G(\%)$	–	58%	<u>3%</u>	33%	–	87%	69%

5 Išvados

1. Skaitinis sprendinys, apskaičiuotas neišreikštinės skirtuminės schemos pagalba, yra neneigiamas, jei $\gamma_0 \in [0, \frac{2(h+\sigma_0)}{h^2 K(0)}]$, $K(x) \geq 0$, $\int_0^1 K(x) dx \leq \rho < 1$;
2. Nagrinėtų svorių aibėje, svoris $K(x) = \sin(2\pi x)$ priartina srovės pavidalą prie klasikinio uždavinio srovės pavidalo;
3. Substrato koncentracijos jautrumas, nepriklausomai nuo svorio arba kraštinių sąlygų parinkimo, yra pastovus 4 ženklų tikslumu;
4. Iš nagrinėtų svorių, $K(x) = \sin(2\pi x)$ geriausiai maksimizuoja srovės gradientą, kai $B_G \in [0, 1]$ (realaus uždavinio atvejis);
5. Stacionarios darbo būklės prietaiso reakcijos laiką geriausiai minimizuoja svoriai $K(x) = \sin(\pi x)$ ir $K(x) = \cos(\frac{\pi x}{2})$;
6. Trumpalaikės darbo būklės prietaiso reakcijos laiką geriausiai minimizuoja svoris $K(x) = \sin(2\pi x)$.

Literatūra

- [1] R. Baronas, F. Ivanauskas and J. Kulys. *Mathematical Modeling of Biosensors*. Springer, 2010.
- [2] A. Samarskii. *The Theory of Difference Schemes*. Marcel Dekker, 2001.
- [3] M. Sapagovas. *Diferencialinių lygčių kraštiniai uždaviniai su nelokaliosiomis sąlygomis*. Mokslo Aidai, 2007.

SUMMARY

Qualitative analysis of solutions of parabolic type equations with nonlocal boundary conditions

J. Novickij, F. Ivanauskas

The aim of the work is qualitative analysis of solutions of parabolic equations, non-negativity of solutions, investigation and modelling of physical parameters. All tasks were modelled using numerical analysis methods. Differential equations were solved using implicit finite difference method. Derived results could be used solving one-dimensional tasks with parabolic type equations in physics, biochemistry, chemistry and other sciences.

Keywords: diffusion equation, diffusion–convection equation, nonlocal boundary conditions, finite difference method.