Liet. matem. rink., T. 41, spec. nr., 497–503

Vieno uždavinio su nelokalia kraštine sąlyga sprendimas

Raimondas ČIEGIS (VGTU), Olga ŠTIKONIENĖ (MII) ir Olga SUBOČ (VGTU)
el. paštas: rc@fm.vtu.lt, olgast@ktl.mii.lt, os@fm.vtu.lt

1. Įvadas

Biologiniai procesai ir gamtoje, ir pramonėje yra labai sudėtingi. Bioinžinerijoje plačiai taikomas matematinis modeliavimas, kuris yra pagrįstas kinetine dalelių teorija bei ląstelių skaičiaus augimo ir gaminamo produkto kiekio įvertinimu [1]. Idealizuoti reaktoriai yra labai abstraktūs tiriamų procesų modeliai, kurie turi būti suderinti su eksperimentiniais duomenimis. Naudodami tokius modelius, siekiame prognozuoti tiriamos sistemos kitimą. Skirtingai nei cheminėse sistemose, kurios gali būti aprašytos termodinamikos ir kinetikos terminais, biologinės sistemos reikalauja specifinės papildomos informacijos, susijusios su mikroorganizmų funkcionavimu. Bokšto tipo reaktoriai dažnai naudojami kultivuojant bakterijas arba mieles. Reaktoriuje tirpalas cirkuliuoja nuo reaktoriaus viršaus į apačią, o dalis išeinančio medžiagos srauto vėl grąžinama į reaktorių.

Šį procesą aprašo diferencialinių lygčių sistema

$$\begin{cases} \dfrac{\partial X}{\partial t} = \dfrac{1}{Bo}\dfrac{\partial^2 X}{\partial z^2} - \dfrac{\partial X}{\partial z} + Da\dfrac{XS}{K+S}, \\ \dfrac{\partial S}{\partial t} = \dfrac{1}{Bo}\dfrac{\partial^2 S}{\partial z^2} - \dfrac{\partial S}{\partial z} - Da\dfrac{XS}{K+S} \end{cases}$$

su nelokaliomis kraštinėmis sąlygomis

$$\begin{aligned} &\frac{\partial X}{\partial z}\Big|_{z=1} = 0, \quad \frac{\partial S}{\partial z}\Big|_{z=1} = 0, \\ &\left(X - \frac{1}{Bo}\frac{\partial X}{\partial z}\right)\Big|_{z=0} = \frac{1}{1+\gamma} + \frac{\gamma}{1+\gamma}X(1,t), \\ &\left(S - \frac{1}{Bo}\frac{\partial S}{\partial z}\right)\Big|_{z=0} = \frac{c}{1+\gamma} + \frac{\gamma}{1+\gamma}S(1,t) \end{aligned}$$

ir pradinėmis sąlygomis $X(z,0) = X_0(z), \quad S(z,0) = S_0(z)$. Čia X yra ląstelių masės koncentracija, S yra substrato koncentracija, Bo yra Bodensteino skaičius, Da yra Damkohlerio skaičius, γ yra perdirbimo koeficientas.

Uždavinių su nelokaliomis kraštinėmis sąlygomis tyrimas šiuo metu yra labai aktualus. Tokio tipo uždaviniai analizuojami darbuose [2, 4], kuriuose pateikta ir išsami literatūros apžvalga.

Antrajame skyriuje nagrinėjamas modelinis stacionarusis difuzijos uždavinys su pastoviais koeficientais ir nelokalia kraštine sąlyga, pagrindinis konvergavimo rezultatas suformuluotas 1 teoremoje. Trečiajame skyriuje nagrinėjamas stacionarusis difuzijos uždavinys su papildomu konvekcijos nariu ir nelokalia kraštine sąlyga, pagrindinis konvergavimo rezultatas suformuluotas 2 teoremoje.

2. Modelinis uždavinys

2.1. *Diferencialinis uždavinys*

Šiame straipsnyje nagrinėsime uždavinius su naujo tipo nelokaliomis kraštinėmis sąlygomis. Mūsų tikslas yra rasti sprendinio egzistavimo ir vienaties sąlygas bei sudaryti ir ištirti baigtinių skirtumų schemas, aproksimuojančias tokius uždavinius. Nagrinėsime du modelinius uždavinius. Pirmasis yra stacionarusis difuzijos uždavinys su pastoviais koeficientais ir nelokalia kraštine sąlyga, kuri susieja sprendinio išvestinę su sprendinio reikšme kitame krašte, antroji kraštinė sąlyga yra antrojo tipo:

$$
\begin{aligned}
&-\frac{1}{Bo}u'' + qu = f, \quad q > 0,\\
&-\frac{1}{Bo}u'(0) = \gamma u(1) + \mu_0,\\
&u'(1) = 0.
\end{aligned}
\tag{1}
$$

1 lema. *Jei γ yra pakankamai mažas, t.y. $\gamma < \gamma_0$, tai egzistuoja vienintelis* (1) *diferencialinio kraštinio uždavinio sprendinys.*

Įrodymas. Naudosime tyrimo metodiką, kuri buvo pasiūlyta [4]. Diferencialinės lygties sprendinį u užrašome kaip dviejų funkcijų sumą $u(x) = v(x) + cw(x)$, čia v yra uždavinio

$$
\begin{aligned}
&-\frac{1}{Bo}v'' + qv = f,\\
&-\frac{1}{Bo}v'(0) = \mu_0,\\
&v'(1) = 0
\end{aligned}
\tag{2}
$$

su Neumano tipo kraštinėmis sąlygomis sprendinys, o w – atitinkamo *charakteringojo* uždavinio

$$
\begin{aligned}
&-\frac{1}{Bo}w'' + qw = 0,\\
&-\frac{1}{Bo}w'(0) = 1,\\
&w'(1) = 0
\end{aligned}
\tag{3}
$$

sprendinys. Konstantą c parenkame taip, kad funkcija u tenkintų nelokaliąją kraštinę sąlygą: $c = \gamma v(1)/(1-\gamma w(1))$. Tada nelygybė $\gamma < 1/w(1)$ yra sprendinio u egzistavimo pakankamoji sąlyga. Funkcijos w reikšmė kraštiniame taške apskaičiuojama tiksliai

$$w(1) = \frac{2\sqrt{Bo}\, e^{\sqrt{qBo}}}{\sqrt{q}\,(e^{2\sqrt{qBo}} - 1)}.$$

Lema įrodyta.

2.2. *Diskretusis uždavinys*

Diferencialinį (1) uždavinį aproksimuojame baigtinių skirtumų schema:

$$\begin{aligned}
&-\frac{1}{Bo}U_{\bar{x}x} + qU = f,\\
&-\frac{1}{Bo}U_{x,0} + \frac{h}{2}(qU_0 - f_0) = \gamma U_N + \mu_0,\\
&U_{\bar{x},N} + \frac{h\,Bo}{2}(qU_N - f_N) = 0.
\end{aligned} \tag{4}$$

Čia ir toliau naudosime baigtinių skirtumų teorijoje priimtus žymėjimus [3]. Globalioji paklaida $Z = U - u$ tenkina uždavinį

$$\begin{aligned}
&-\frac{1}{Bo}Z'' + qZ = \psi,\\
&-\frac{1}{Bo}Z_{x,0} + \frac{h}{2}qZ_0 = \gamma Z_N + \psi_0,\\
&Z_{\bar{x},N} + \frac{h\,Bo}{2}qZ_N = \psi_N.
\end{aligned} \tag{5}$$

Šios schemos netiktis $\|\psi\|_C = \mathcal{O}(h^2)$.

1 teorema. *Sakykime, kad išpildyta sąlyga* $\gamma < \gamma_1$. *Tada* (4) *baigtinių skirtumų schemos sprendinys* U *konverguoja į* (1) *diferencialinio uždavinio sprendinį* u, *o globaliajai paklaidai teisingas įvertis*

$$\|U - u\|_C = \mathcal{O}(h^2).$$

Įrodymas. Diskrečiajam uždaviniui taikome tą pačią tyrimo schemą. Paklaidos funkciją išskaidome į sumą $Z = V + cW$, čia V yra pagalbinio uždavinio

$$\begin{aligned}
&-\frac{1}{Bo}V_{\bar{x}x} + qV = \psi,\\
&-\frac{1}{Bo}V_{x,0} + \frac{h}{2}qV_0 = \psi_0,\\
&V_{\bar{x},N} + \frac{h\,Bo}{2}qV_N = \psi_N
\end{aligned} \tag{6}$$

sprendinys, o W yra charakteringojo uždavinio

$$
\begin{aligned}
&-\frac{1}{Bo}W_{\bar{x}x} + qW = 0, \\
&-\frac{1}{Bo}W_{x,0} + \frac{h}{2}qW_0 = 1, \\
&W_{\bar{x},N} + \frac{h\,Bo}{2}qW_N = 0
\end{aligned}
\tag{7}
$$

sprendinys. Konstantą c parenkame taip, kad Z tenkintų nelokaliąją kraštinę sąlygą: $c = \gamma V_N/(1-\gamma W_N)$. Naudodami standartinį energetinį metodą ir įdėjimo teoremą įvertiname (6) uždavinio sprendinį $\|V\|_C \leqslant C(\|V_{\bar{x}}]|^2 + |[V]|^2)^{0.5} = \mathcal{O}(h^2)$. Funkciją W apskaičiuojame išreikštine formule, iš jos gauname, kad W yra aprėžta funkcija $\|W\|_C = \mathcal{O}(1)$. Imdami $\gamma < (1-\varepsilon_0)/W_N$ gauname, kad $|c| \leqslant ((1-\varepsilon_0)\|V\|_C)/\varepsilon_0 = \mathcal{O}(h^2)$. Tada globalioji paklaida įvertinama nelygybe $\|Z\|_C \leqslant \|V\|_C + |c|\cdot\|W\|_C = \mathcal{O}(h^2)$.

3. Modelinis uždavinys su konvekcija

3.1. *Diferencialinis uždavinys*

Nagrinėsime antrąjį modelinį uždavinį

$$
\begin{aligned}
&-\frac{1}{Bo}u'' + u' + qu = f, \quad q > 0, \\
&-\frac{1}{Bo}u'(0) + u(0) = \gamma u(1) + \mu_0, \\
&u'(1) = 0.
\end{aligned}
\tag{8}
$$

Šiuo atveju lygtyje yra papildomas konvekcijos narys u', kurį nelokalioje kraštinėje sąlygoje atitinka narys $u(0)$.

2 lema. *Jei γ yra pakankamai mažas, t.y. $\gamma < \gamma_2$, tai egzistuoja vienintelis* (8) *diferencialinio kraštinio uždavinio sprendinys.*

Įrodymas. Lemos įrodymas analogiškas 1 lemai. Sprendinio u ieškome pavidalu $u = v + cw$, čia v yra uždavinio

$$
\begin{aligned}
&-\frac{1}{Bo}v'' + v' + qv = f, \\
&-\frac{1}{Bo}v'(0) + v(0) = \mu_0, \\
&v'(1) = 0
\end{aligned}
\tag{9}
$$

sprendinys, o w - naujo charakteringojo uždavinio

$$
\begin{aligned}
&-\frac{1}{Bo}w'' + w' + qw = 0,\\
&-\frac{1}{Bo}w'(0) + w(0) = 1,\\
&w'(1) = 0
\end{aligned} \tag{10}
$$

sprendinys. Šiuo atveju tiksli antrojo pagalbinio uždavinio sprendinio reikšmė kraštiniame taške yra

$$
w(1) = \frac{2\sqrt{D}\,e^{\frac{1}{2}(Bo+\sqrt{D})}}{\sqrt{D} - Bo - 2q + e^{\sqrt{D}}(\sqrt{D} + Bo + 2q)}, \quad D = Bo(Bo + 4q).
$$

Nesunku patikrinti, kad $w(1) > 0$. Tada nelygybė $\gamma < 1/w(1)$ yra sprendinio u egzistavimo pakankamoji sąlyga.

3.2. *Dviejų modelinių uždavinių išsprendžiamumo aibių palyginimas*

Išanalizuokime difuzijos, konvekcijos ir absorpcijos įtaką sprendinio egzistavimo pakankamosios sąlygos intervalo ilgiui. Abiem modeliniams uždaviniams apskaičiavome charakteringosios funkcijos reikšmes $w(1)$. Rezultatai, gauti atlikus skaičiavimus su paketu MapleV, pateikti 1 lentelėje.

Pateiktieji rezultatai rodo, kad papildomas konvekcijos procesas tik prie mažų parametro q reikšmių didina konvergavimo intervalą, bet bendruoju atveju trijų procesų sąveika yra pakankamai sudėtinga ir konvergavimo intervalo ilgis gali sumažėti.

1 lentelė. Sprendinio egzistavimo pakankamosios sąlygos intervalo ilgio $\gamma_0 = 1/w(1)$ priklausomybė nuo uždavinio parametrų

Bo	q	uždav.(1)	uždav. (8)
5	0,01	0,0101	1,0099
	0,1	0,1085	1,1035
	1	2,0683	2,4004
	2	7,4571	4,8924
	5	74,0741	25,7069
	10	833,3333	196,0784
20	0,01	0,0103	1,0099
	0,1	0,1368	1,1046
	0,5	1,8643	1,6299
	1	9,7847	2,6028

3.3. *Diskretusis uždavinys*

Diferencialinį uždavinį su konvekcijos nariu aproksimuojame baigtinių skirtumų schema

$$\begin{aligned}
&-\frac{1}{Bo}U_{\bar{x}x} + U_{\overset{\circ}{x}} + qU = f,\\
&-\frac{1}{Bo}U_{x,0} + U_0\big(1 + \frac{h}{2}(Bo + q)\big) = \tilde{\gamma}U_N + \mu_0(1 + \frac{h}{2}Bo) + \frac{h}{2}f_0,\\
&U_{\bar{x},N} + \frac{h\,Bo}{2}(qU_N - f_N) = 0,
\end{aligned} \tag{11}$$

čia $\tilde{\gamma} = \gamma(1 + \frac{h}{2}Bo)$. Tada globalioji paklaida $Z = U - u$ tenkina uždavinį

$$\begin{aligned}
&-\frac{1}{Bo}Z_{\bar{x}x} + Z_{\overset{\circ}{x}} + qZ = \psi,\\
&-\frac{1}{Bo}Z_{x,0} + Z_0\big(1 + \frac{h}{2}(Bo + q)\big) = \tilde{\gamma}Z_N + \psi_0,\\
&Z_{\bar{x},N} + \frac{h}{2}\,BoqZ_N = \psi_N.
\end{aligned} \tag{12}$$

2 teorema. *Sakykime, kad tenkinama sąlyga $\gamma < \gamma_3$. Tada pakankamai mažiems $h \leqslant h_0$ (11) baigtinių skirtumų schemos sprendinys U konverguoja į (8) diferencialinio uždavinio sprendinį u, o globalioji paklaida tenkina įvertį*

$$\|U - u\|_C = O(h^2).$$

Įrodymas. Apibrėžiame atitinkamus pagalbinius diskrečiuosius uždavinius

$$\begin{aligned}
&-\frac{1}{Bo}V_{\bar{x}x} + V_{\overset{\circ}{x}} + qV = \psi,\\
&-\frac{1}{Bo}V_{x,0} + V_0\big(1 + \frac{h}{2}(Bo + q)\big) = \psi_0,\\
&V_{\bar{x},N} + \frac{h\,Bo}{2}qV_N = \psi_N,
\end{aligned} \tag{13}$$

ir

$$\begin{aligned}
&-\frac{1}{Bo}W_{\bar{x}x} + W_{\overset{\circ}{x}} + qW = 0,\\
&-\frac{1}{Bo}W_{x,0} + W_0\big(1 + \frac{h}{2}(Bo + q)\big) = 1,\\
&W_{\bar{x},N} + \frac{h\,Bo}{2}qW_N = 0.
\end{aligned} \tag{14}$$

Kaip ir 1 teoremoje konstanta c parenkama taip, kad Z tenkintų nelokaliąją kraštinę sąlygą: $c = \gamma V_N/(1-\gamma W_N)$. Naudodami energetinį metodą, gauname lygybę

$$\begin{aligned}(\frac{1}{Bo}\|V_{\bar{x}}]|^2 + q|[V]|^2) + \frac{1}{2}V_0^2(1 - \frac{h^2}{2}Bo(Bo+q)) + \frac{1}{2}V_N^2(1 + \frac{h^2}{2}Bo\, q) \\ = (\psi, V) + (1 - \frac{h}{2}Bo)\,\psi_0 V_0 + (\frac{1}{Bo} + \frac{h}{2})\,\psi_N V_N.\end{aligned}$$

Tada imdami $h^2 < 2/(Bo(Bo+q))$ bei naudodami įdėjimo teoremą įvertiname (13) uždavinio sprendinį $\|V\|_C \leqslant \tilde{C}(\|V_{\bar{x}}]|^2 + |[V]|^2)^{0.5} = \mathcal{O}(h^2)$. Funkciją W apskaičiuojame išreikštine formule, iš jos gauname, kad W yra aprėžta funkcija $\|W\|_C = \mathcal{O}(1)$. Imdami $\gamma < (1-\varepsilon_1)/W_N$ gauname, kad $|c| \leqslant ((1-\varepsilon_1)\|V\|_C)/\varepsilon_1 = \mathcal{O}(h^2)$. Tada globalioji paklaida įvertinama nelygybe $\|Z\|_C \leqslant \|V\|_C + |c| \cdot \|W\|_C = \mathcal{O}(h^2)$.

Literatūra

[1] K. Schügerl, *Bioreaction Engineering: Reactions Involving Microorganisms and Cells, Fundamentals, thermodinamics, formal kinetics, idealized reactor types and operation modes*, Vol.1, John Wiley&Sons Ltd, Chichester, New York, Brisbane, Toronto, Singapore (1987).

[2] A.V. Goolin, N.I. Ionkin, V.A. Morozova, Difference schemes with nonlocal boundary conditions, *Computational Methods in Applied Mathematics*, 1(1), 62–71 (2001).

[3] A.A. Samarskii, *Theory of Difference Schemes*, Nauka, Moscow (1989) (in Russian).

[4] M. Sapagovas, R. Čiegis, On some boundary problems with nonlocal conditions, *Differents. Uravn.*, 23(7), 1268–1274 (1987).

On one problem with non-local boundary conditions

R. Čiegis, O. Štikonienė, O. Subač

In this article two problems with non-local boundary conditions are analysed: stationary diffusion problem with constant coeficients and non-local boundary condition, and stationary diffusion problem with additional convection term and non-local boundary condition. Finite difference schemes are constructed and investigated. The sufficient conditions for the existence of an unique solution are obtained.