УДК 519.6.

ОДНОМЕРНАЯ В ГОРИЗОНТАЛЬНОЙ ПЛОСКОСТИ МОДЕЛЬ С УЧЕТОМ ПЕРЕНОСА И ДИФФУЗИИ ВЕЩЕСТВА

Королева А.Е.,
научный руководитель канд. физ.-мат. наук, доцент Распопов В.Е.
Сибирский Федеральный Университет

Рассматривается одна из математических моделей «субстрат – фермент».

Постановка прямой задачи.

Требуется найти функции $u_1(t,x), u_2(t,x)$, удовлетворяющие начально-краевой задаче для системы уравнений параболического типа:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u_1}{\partial t} = \mu_1 \dfrac{\partial^2 u_1}{\partial x^2} - v\dfrac{\partial u_1}{\partial x} + a\dfrac{u_1 u_2}{(k+u_2)} + f_1, \\ \dfrac{\partial u_2}{\partial t} = \mu_2 \dfrac{\partial^2 u_2}{\partial x^2} - v\dfrac{\partial u_2}{\partial x} - b\dfrac{u_1 u_2}{(k+u_2)} + f_2. \end{cases} \quad (1)$$

$$u_1(t,0) = u_1^0(t), \quad u_2(t,0) = u_2^0(t), \quad (2)$$

$$u_1(t,1) = u_1^1(t), \quad u_2(t,1) = u_2^1(t), \quad (3)$$

$$u_1(0,x) = w_1(x), \quad u_2(0,x) = w_2(x), \quad \{0 \le x \le 1, 0 \le t \le 1\}, \quad (4)$$

Где

$a, b, k -$ заданные положительные функции или константы,

$\mu_1(t,x) > 0$, $\mu_2(t,x) > 0$ –коэффициенты турбулентной диффузии в горизонтальном направлении,

$v(t,x)$ – скорость переноса,

$f_1(t,x), f_2(t,x) -$ функции, отвечающие за внешнее поступление или вынос веществ из системы,

$t -$ время,

$x -$ пространственная переменная,

$u_1(t,x)$, $u_2(t,x)$ трактуем как концентрации веществ.

Разностная аппроксимация.

Задачу (1)-(4) будем решать численно. В области $\bar{\Omega} = [0,1] \times [0,1]$ строим равномерную прямоугольную сетку $\Omega_{\tau,h} = \{(t_n, x_j) \mid t_n = n\tau, x_j = jh,$ $0 \le n \le N, 0 \le j \le M, \tau N = 1, hM = 1\}$. Будем искать сеточные функции $y_{1,j}^n, y_{2,j}^n$, определенные на $\Omega_{\tau,h}$, которые являются приближенными значениями соответственно $u_1(t_n, x_j)$, $u_2(t_n, x_j)$.

Явная конечно-разностная схема:

$$\begin{cases} \dfrac{y_{1,j}^{n+1} - y_{1,j}^n}{\tau} = \mu_{1,j}^n \dfrac{y_{1,j-1}^n - 2y_{1,j}^n + y_{1,j+1}^n}{h^2} - v_j^n \dfrac{y_{1,j+1}^n - y_{1,j-1}^n}{2h} \\ \qquad + a_j^n \dfrac{y_{1,j}^n y_{2,j}^n}{k + y_{2,j}^n} + f_{1,j}^n, \\ \dfrac{y_{2,j}^{n+1} - y_{2,j}^n}{\tau} = \mu_{2,j}^n \dfrac{y_{2,j-1}^n - 2y_{2,j}^n + y_{2,j+1}^n}{h^2} - v_j^n \dfrac{y_{2,j+1}^n - y_{2,j-1}^n}{2h} - \\ \qquad - b_j^n \dfrac{y_{1,j}^n y_{2,j}^n}{k + y_{2,j}^n} + f_{2,j}^n, \end{cases}$$

где $n = 1, \dots, N-1$, $j = 1, \dots, M-1$.

$y_{1,0}^n = u_1^0(t_n)$, $y_{2,0}^n = u_2^0(t_n)$,

$y_{1,M}^n = u_1^1(t_n), \quad y_{2,M}^n = u_2^1(t_n),$
$y_{1,j}^0 = w_1(x_j), \quad y_{2,j}^0 = w_2(x_j), \{0 \le n \le N, 0 \le j \le M\}$

Разностную задачу решаем последовательно по слоям по времени по формулам:

$$y_{1,j}^{n+1} = \tau \cdot \left(a_j^n \frac{y_{1,j}^n y_{2,j}^n}{k + y_{2,j}^n} + f_{1,j}^n + \mu_1 \frac{y_{1,j+1}^n - 2y_{1j}^n + y_{1,j-1}^n}{h^2} - v_j^n \frac{y_{1,j+1}^n - y_{1,j-1}^n}{2h} \right) + y_{1,j}^n, \quad (5)$$

$$y_{2,j}^{n+1} = \tau \cdot \left(-b_j^n \frac{y_{1,j}^n y_{2,j}^n}{k + y_{2,j}^n} + f_{2,j}^n + \mu_2 \frac{y_{2,j+1}^n - 2y_{2j}^n + y_{2,j-1}^n}{h^2} - v_j^n \frac{y_{2,j+1}^n - y_{2,j-1}^n}{2h} \right) + y_{2,j}^n. \quad (6)$$

Неявная конечно-разностная схема:

$$\begin{cases} \dfrac{y_{1,j}^{n+1} - y_{1,j}^n}{\tau} = \mu_1 \dfrac{y_{1,j-1}^{n+1} - 2y_{1,j}^{n+1} + y_{1,j+1}^{n+1}}{h^2} - v_j^n \dfrac{y_{1,j+1}^n - y_{1,j-1}^n}{2h} + \\ \qquad + a \dfrac{y_{1,j}^n y_{2,j}^n}{k + y_{2,j}^n} + f_{1,j}^n, \\ \dfrac{y_{2,j}^{n+1} - y_{2,j}^n}{\tau} = \mu_2 \dfrac{y_{2,j-1}^{n+1} - 2y_{2,j}^{n+1} + y_{2,j+1}^{n+1}}{h^2} - v_j^n \dfrac{y_{2,j+1}^n - y_{2,j-1}^n}{2h} - \\ \qquad - b \dfrac{y_{1,j}^n y_{2,j}^n}{k + y_{2,j}^n} + f_{2,j}^n, \end{cases}$$

где $n = 1, \dots, N-1, \ j = 1, \dots, M-1.$

$y_{1,0}^n = u_1^0(t_n), \quad y_{2,0}^n = u_2^0(t_n),$

$y_{1,M}^n = u_1^1(t_n), \quad y_{2,M}^n = u_2^1(t_n),$

$y_{1,j}^0 = w_1(x_j), \quad y_{2,j}^0 = w_2(x_j), \{0 \le n \le N, 0 \le j \le M\}$

Разностную задачу решаем последовательно по слоям по времени. На каждом слое получаем СЛАУ с трехдиагональной матрицей, решение которой находим методом прогонки.

Предложенные разностные схемы аппроксимируют дифференциальную задачу (1)-(4) с порядком $O(\tau + h^2)$.

Постановка обратных задач.

Задача I

Пусть в поставленной задаче (1)-(4) кроме неизвестных функций $u_1(t,x), u_2(t,x)$ требуется найти также коэффициент k. Дополнительно ставим условие переопределения:

$$u_1(t,\xi) = \beta(t), \quad \{0 \le t \le 1\}, \quad (7)$$

где ξ- фиксированная точка из интервала $(0,1)$, $\beta(t) -$ заданная функция.

Разностная аппроксимация.

Считаем, что точке ξ соответствует узел с номером L, поэтому условие переопределения (7) принимает вид:

$y_{1,L}^n = \beta(t_n), \quad n = 0, \dots, N.$

Разностную задачу решаем последовательно по слоям по времени. Для задачи I на каждом слое сначала находим k^n, положив в первом уравнении j=L,

$$k^n = a\frac{y_{1,L}^n\, y_{2,L}^n}{\frac{y_{1,L}^{n+1} - y_{1,L}^n}{\tau} - \mu\,\frac{y_{1,L+1}^n - 2y_{1,L}^n + y_{1,L-1}^n}{h^2} + v_L^n\,\frac{y_{1,L+1}^n - y_{1,L-1}^n}{2h} - f_{1,L}^n} - y_{2,L}^n.$$

Все величины в правой части нам известны из условия переопределения, либо найдены на предыдущем слое. Затем находим $y_{1,J}^n$ и $y_{2,J}^n$ по формулам (5)-(6).

Задача II

Пусть в поставленной задаче (1)-(4) кроме неизвестных функций $u_1(t,x), u_2(t,x)$ требуется найти также коэффициент μ_1. Дополнительно ставим условие переопределения:

$$\mu_1 \frac{\partial u_1}{\partial x}\bigg|_{x=0} = \gamma(t), \quad \{0 \le t \le 1\},$$

$\gamma(t) -$ заданная функция.

Разностную задачу решаем итерационным методом.

1) Произвольно задаем $\mu_1^{(0)}(t_{n+1})$ на нулевой итерации.

По формулам (5)-(6) находим $y_{1,j}^{(0)\,n+1}, y_{2,j}^{(0)\,n+1}$.

2) Затем из разностной аппроксимации условия переопределения находим $\mu_1^{(1)}(t_{n+1})$ по формуле:

$$\mu_1^{(s+1)}(t_{n+1}) = \gamma(t_{n+1})\frac{2h}{-3\,y_{1,0}^{(s)\,n+1} + 4y_{1,1}^{(s)\,n+1} - y_{1,2}^{(s)\,n+1}}$$

С найденным $\mu_1^{(1)}(t_{n+1})$ вычисляем $y_{1,j}^{(1)\,n+1}, y_{2,j}^{(1)\,n+1}$ и так далее.

Итерации ведем до тех пор, пока не будет выполнено условие:

$$\left|\mu_1^{(s+1)}(t_{n+1}) - \mu_1^{(s)}(t_{n+1})\right| \le \varepsilon$$

Для проведения численных расчетов была написана программа для ЭВМ на языке MS Visual C++ 6.0. Расчеты, проведенные на тестах, показали, что с уменьшением шагов сетки погрешность численных решений на рассмотренных тестах убывает. Это позволяет сделать предположение о сходимости разностных задач, а также о применимости предложенных алгоритмов для идентификации коэффициентов аналогичных математических моделей.