

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ВОРОНЕЖСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

На правах рукописи



Барабаш Ольга Павловна

**МОДИФИЦИРОВАННАЯ ДИСКРЕТИЗАЦИЯ И
ПРОГРАММНАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ ДЛЯ НЕЛИНЕЙНЫХ
НЕПРЕРЫВНЫХ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ РОСТА И
РАСПРОСТРАНЕНИЯ**

1.2.2. Математическое моделирование, численные методы и комплексы
программ

Диссертация

на соискание ученой степени
кандидата физико–математических наук

Научный руководитель:
доктор физико–математических наук, доцент
Половинкин И.П.

Воронеж – 2025

Оглавление

Введение	5
1. Основное уравнение в моделировании роста и распространения	11
1.1. Исходные предпосылки к моделированию роста и распространения и примеры математических моделей	11
1.2. Основные численные методы для дискретизации континуальных моделей роста и распространения	16
1.3. Моделирование роста и распространения грибом	19
1.4. Выводы. Цель и задачи исследования	34
2. Дискретизация нелинейной математической модели роста–распространения	36
2.1. Построение разностной схемы для уравнения роста–распространения. Порядок аппроксимации	37
2.2. Решение системы линейных алгебраических уравнений дискретной модели роста–распространения	41
2.3. Априорная оценка	43
2.4. Исследование монотонности и устойчивости в дискретной модели	49
2.5. Выводы	53
3. Сингулярная модель роста–распространения и базовые инструменты ее дискретизации	54
3.1. Основной инструментарий исследования одномерной стационарной сингулярной модели распределения субстанции	54
3.1.1. Формула Тейлора с оператором Бесселя	54
3.1.2. Интерполяция на отрезке $[0, 1]$	57

3.1.3.	Интерполяционные свойства пространства $H_\gamma^2(x_j, x_{j+1})$	59
3.1.4.	Сплайн–интерполяция в пространстве $H_\gamma^2(0, 1)$	64
3.1.5.	Применение метода Рунге в энергетическом пространстве к сингулярной стационарной модели	67
3.1.6.	Абстрактная оценка ошибки в одномерной стационарной сингулярной модели	72
3.1.7.	Численная реализация алгоритма построения приближенного решения по методу Рунге в одномерной сингулярной стационарной модели	73
3.2.	Нестационарная одномерная сингулярная модель распространения субстанции	79
3.2.1.	Математическая формализация одномерной нестационарной сингулярной модели распространения субстанции	79
3.2.2.	Построение проекционно–сеточной схемы для одномерной нестационарной модели распространения	82
3.2.3.	Численная реализация алгоритма построения приближенного решения в нестационарной модели	83
3.2.4.	Оценки сходимости	86
3.3.	Непрерывная и дискретная сингулярные модели роста–распространения	95
3.4.	Конечно–разностная дискретизация двумерных непрерывных сингулярных стационарных моделей	98
3.4.1.	Математическая формализация модели	98
3.4.2.	Дискретизация непрерывной модели при повышенных условиях гладкости решения	98
3.4.3.	Дискретизация непрерывной модели при ослабленных условиях на гладкость решения	102
3.5.	Выводы	114
4.	Комплекс программ	115
4.1.	Интерфейс пользователя	115
4.1.1.	Интерфейс пользователя для реализации регулярной модели роста–распространения	115

4.1.2.	Интерфейс пользователя для сингулярной модели роста–распространения	119
4.2.	Реализация на языке Python	119
4.2.1.	Реализация на языке Python для регулярной модели роста–распространения	119
4.2.2.	Реализация на языке Python для сингулярной модели роста–распространения	121
4.3.	Диаграммы классов и сценариев	122
4.4.	Результаты вычислительного эксперимента	123
4.4.1.	Результаты вычислительного эксперимента для регулярной модели роста–распространения	123
4.4.2.	Результаты вычислительного эксперимента для сингулярной модели роста–распространения	134
4.5.	Вычислительная сложность	138
4.6.	Выводы	138
	Заключение	139
	Список литературы	140
	Приложение. Свидетельства о регистрации программ для ЭВМ	154

Введение

Актуальность темы. Диссертация посвящена созданию и исследованию свойств семейства дискретных математических моделей роста и распространения на основе известных непрерывных моделей. Основой для этих моделей служит закон сохранения субстанции в дифференциальной форме. Дискретная модель позволяет перейти к компьютерному моделированию, и поэтому вызывает постоянный интерес исследователей. В диссертации основное внимание сосредоточено на сеточных конечно-разностных и проекционных методах дискретного моделирования.

Универсальным и крайне важным методом дискретного моделирования является метод конечных разностей. Ключевыми вопросами при построении моделей этим методом выступают аппроксимация, устойчивость и сходимость.

Проекционно-сеточные методы (методы конечных элементов) на сегодняшний день являются чрезвычайно действенными методами решения задач систематического моделирования. Эффективность использования таких алгоритмов обусловлена тем, что они по своей форме являются вариационными или проекционными и обладают всеми их преимуществами, а с другой стороны, приводят к системам алгебраических уравнений, подобным возникающим в разностных методах.

Во всех случаях велика роль численного эксперимента, особенно когда остаются непроработанными вопросы, связанные со сходимостью приближенных методов. В настоящее время в разделе, называемом «инженерная математика», вычислительному эксперименту отводится ключевая роль.

Объект исследования — непрерывные нелинейные математические модели роста и распространения и инструменты их дискретизации.

Предметом исследования являются разностные, проекционно-сеточные методы для моделей распределения, распространения и роста со степенной нелинейностью и их свойства.

Степень разработанности темы исследования.

В настоящее время огромный практический интерес представляют нелинейные модели роста, а также роста и распространения (или иначе реакции-диффузии), поскольку переход к математическому моделированию позволяет в ряде случаев, заменяя реальные наблюдения и измерения анализом математических моделей, прогнозировать течение процесса и помогает выработать эффективные подходы к исследованию и прогнозированию.

О методах дискретизации таких нелинейных моделей можно сказать, что это недостаточно исследованная область, представляющая существенный практический интерес в последние годы. Большое число работ посвящено однородным разностным схемам, устойчивым на любых допустимых сетках (см. например работы А.А. Самарского, А.В. Гулина [42]- [44]). По поводу дискретизации нелинейных моделей следует отметить работы П.П. Матуса [85], [86]. Эти работы могут считаться отправной точкой для дальнейшего развития методов дискретизации нелинейных моделей роста-распространения.

Таким образом, создание дискретных математических моделей на основе нелинейной модели роста и распространения представляется актуальной научной и важной прикладной проблемой.

Цель диссертационной работы — разработка, обоснование и тестирование эффективных вычислительных методов дискретизации непрерывных нелинейных математических моделей роста и распространения с применением современных компьютерных технологий.

Задачами, порожденными сформулированной целью, являются:

1. Построение, математическое обоснование и численная реализация эффективных линейных конечно-разностных схем для непрерывной нелинейной модели роста и распространения с применением современных компьютерных технологий.

2. Разработка новой дискретной математической модели и эффективного численного метода дискретизации непрерывной сингулярной модели роста и распространения. Разработка и обоснование эффективных вычислительных методов для дискретизации плоской стационарной сингулярной модели распределения субстанции.

3. Создание комплекса программ для исследования проблемы роста и распространения с применением разработанной в рамках диссертации технологии

дискретного математического моделирования и проведения вычислительного эксперимента.

Область исследований. Диссертация соответствует следующим пунктам паспорта специальности:

1. Разработка новых математических методов моделирования объектов и явлений (пункт 1).

2. Реализация эффективных численных методов и алгоритмов в виде комплексов проблемно-ориентированных программ для проведения вычислительного эксперимента (пункт 3).

3. Комплексные исследования научных и технических проблем с применением современной технологии математического моделирования и вычислительного эксперимента (пункт 8).

Научная новизна диссертационного исследования.

В диссертации установлены следующие новые научные результаты:

1. Разработан, обоснован и протестирован эффективный линейный вычислительный метод для непрерывной нелинейной модели роста и распространения с применением современных компьютерных технологий, отличающийся от существующих тем, что он приводит к системе линейных алгебраических уравнений и позволяющий получить оценку порядка аппроксимации и достаточное условие устойчивости.

2. Разработаны новые дискретные математические модели на основе непрерывной сингулярной модели распространения, непрерывной нелинейной сингулярной модели роста-распространения с помощью проекционно-сеточного метода Бубнова-Галеркина, отличающегося применением финитных сплайнов особого вида и позволяющего доказать оценку погрешности в весовом функциональном пространстве, а также дискретизация плоской непрерывной сингулярной стационарной модели распределения субстанции, отличающаяся учетом ослабленных требований к гладкости решения и позволяющая получить априорную оценку.

3. На основе разработанной в рамках диссертации технологии создания дискретных линейных математических моделей создан комплекс программ, позволяющий осуществлять проведение вычислительных экспериментов в рамках исследования проблемы роста-распространения.

Степень достоверности результатов. Достоверность полученных тео-

ретических результатов и положений обоснована строгостью применяемых методов исследования, корректностью использования математического аппарата. В модельных задачах, допускающих нахождение точного решения, результаты, полученные при реализации построенных в диссертации приближенных методов с помощью созданных программных продуктов, согласуются с точными решениями с незначительной погрешностью. В случае применения разработанного комплекса программ к задачам с использованием данных натуральных измерений наблюдается соответствие между результатами расчетов и результатами наблюдений.

Апробация результатов. Результаты работы докладывались и обсуждались на следующих конференциях: на IV Международной научно-практической конференции «Математическое моделирование, программирование и прикладная математика» (г. Великий Новгород, 7–8 ноября 2022 г.); на Международной научной конференции «Актуальные проблемы прикладной математики, информатики и механики» (г. Воронеж, 12–14 декабря 2022г.); на Международной научной конференции «Воронежская зимняя математическая школа» (г. Воронеж, 27 января–1 февраля 2023г.); на Международной научной конференции «Воронежская зимняя математическая школа» (г. Воронеж, 30 января–4 февраля 2025г.).

Методология и методы исследования. В работе использованы классические методы исследования конечно-разностных схем, их сходимости и устойчивости с привлечением аппарата математического анализа, функционального анализа, вычислительной математики, методы, развитые в работах научной школы И.А. Киприянова при исследовании весовых функциональных пространств и сингулярных дифференциальных уравнений, а также методика сравнения результатов, полученных в ходе численного эксперимента, с натурными данными, а при уникальном сочетании начальных и краевых условий, допускающем точное решение, было проведено сравнение с точным решением.

Теоретическая и практическая значимость диссертации заключается в том, что разработанные в ней методы линейной дискретизации нелинейных моделей роста и распространения приводят к вычислительным алгоритмам, имеющим линейную сложность, что упрощает их использование при исследовании моделируемых процессов. В этом состоит преимущество разработанных в диссертации разностных методов по сравнению с известными нелинейными

методами.

Разработанный программный комплекс позволяет осуществлять прогнозирование роста и распространения. Этот комплекс был протестирован в двух ситуациях. Во-первых, при уникальном сочетании начальных и граничных условий известна явная формула представления точного решения рассматриваемой начально–краевой задачи первого рода. Полученные результаты численного эксперимента отличаются от точного решения со статистической погрешностью. Во-вторых, среди возможных применений разработанных методов было выбрано приложение к моделированию роста и распространения глиомы, после чего был выбран вариант тестирования, опирающийся на исходные данные этой предметной области. Результаты численного эксперимента согласуются с результатами измерений при введенных исходных данных. Получены свидетельства о регистрации программ для ЭВМ:

1. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ 2024663009 Российская Федерация. Численное решение начально–краевой задачи для одномерного квазилинейного уравнения реакции–диффузии / О.П. Барабаш; заявитель и правообладатель Барабаш О.П. — № 2024661715/69; заявление 21.05.2024; опубл. 03.06.2024.

2. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ 2024689152 Российская Федерация. Программа численного расчета для сингулярного нелинейного уравнения реакции–диффузии / О.П. Барабаш; заявитель и правообладатель Барабаш О.П. — № 2024687972/69; заявление 21.11.2024; опубл. 04.12.2024.

В рамках сформулированной в работе проблемы **на защиту выносятся следующие положения:**

1. Построена разностная схема для регулярной нелинейной модели роста–распространения, отличающаяся линейной структурой, позволяющая осуществлять численный эксперимент в условиях пониженной алгоритмической сложности, получена оценка ее порядка аппроксимации $O(h^2 + \tau)$, достаточные условия устойчивости, позволяющие сделать вывод о ее сходимости.

2. Разработан и обоснован эффективный численный метод дискретизации сингулярной непрерывной модели распространения с использованием проекционно–сеточного метода Бубнова–Галеркина с финитными сплайнами специального вида, позволяющий доказать оценку погрешности в весовом

функциональном пространстве, на основе которого проведена и протестирована дискретизация нелинейной сингулярной модели роста–распространения, кроме того, построена дискретизация плоской непрерывной сингулярной стационарной модели распределения субстанции, позволяющая учесть ослабленные требования к гладкости решения и получить априорную оценку.

3. Разработаны алгоритм реализации линейной разностной схемы для регулярной нелинейной модели роста–распространения и реализующая его программа для ЭВМ «Численное решение начально–краевой задачи для одномерного квазилинейного уравнения реакции–диффузии», алгоритм реализации линейной разностной схемы для сингулярной нелинейной модели роста–распространения и реализующая его программа для ЭВМ «Программа численного расчета для сингулярного нелинейного уравнения реакции–диффузии», позволяющие осуществлять вычислительные эксперименты в рамках исследования процессов роста–распространения.

Личный вклад соискателя. В количественном выражении в опубликованных работах личный вклад соискателя 4.628 печатных листов, что составляет 91% от общего количества печатных листов равного 5.063 п.л.. Основные результаты и положения, выносимые на защиту, получены лично автором. Совместно с научным руководителем проводилась постановка задачи, обсуждались полученные основные научные результаты и формировались выводы.

Публикации. Основные результаты диссертации опубликованы в 12 научных работах, из которых публикации в изданиях, рекомендованных ВАК при Минобрнауки РФ и приравненных к ним — [111]- [113], индексируемые в международной базе GeoRef — [114]- [115], публикации в прочих изданиях — [116]- [122]. Получены два свидетельства о государственной регистрации программы для ЭВМ [123]- [124].

Структура и объем диссертации Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения, списка литературы и приложения. Работа изложена на 155 страницах. Список литературы, который содержит 124 наименования, включает статьи, содержащие результаты работы, а также два свидетельства о государственной регистрации программы для ЭВМ.

Глава 1.

Основное уравнение в моделировании роста и распространения

1.1. Исходные предпосылки к моделированию роста и распространения и примеры математических моделей

Законы сохранения, лежащие в основе моделирования роста и распространения

В 1937 году А.Н. Колмогоров вместе с соавторами доказали существование и единственность решения начально–краевой задачи для параболического уравнения реакции–диффузии [23]. В это же время английский ученый Р. Фишер в своей статье [66] предложил это уравнение в контексте популяционной динамики для описания пространственного распространения полезной аллели и исследовал его решения, имеющие вид бегущей волны. Справедливости ради, стоит отметить, что первоначально уравнение было предложено Г. Хотеллингом в 1921 г. [75] в качестве модели, описывающей популяционный рост и распространение. На основе принципов Мальтуса рост моделировался как логистический процесс. Построение миграционных процессов в пространстве осуществлялось с использованием теории Фурье распространения тепла. Это уравнение можно называть и уравнением Хотеллинга.

Работа [32] посвящена изучению устойчивости стационарного решения уравнения Хотеллинга. Немаловажны содержательные обобщения данного уравнения. Так в работе А.В. Борисова, Р.О. Резаева [4] приведено исследование нелокальных эффектов на динамику популяции микроорганизмов в рамках модели, обобщающей модель Фишера–Колмогорова–Петровского–Пискунова.

Основным объектом наших исследований является семейство нелинейных моделей распределения, распространения, роста и инструменты их дискретизации. К построению этого семейства математических моделей можно подойти, следуя классическим принципам, изложенным в [95]. Эти модели сочетают в себе свойства моделей диффузии (теплопроводности) и изменения (роста) некоторой субстанции, обусловленного внутренней склонностью к изменениям. Как и многие модели математической физики, биологии, математической экономики, они опираются на те или иные законы сохранения. Если в рассматриваемой системе происходят процессы реакции, сопровождающиеся диффузией, эти законы сохранения ведут к набору соотношений с частными производными для искомых количественных характеристик. Этими величинами могут быть: концентрация по массе в химических процессах, температура в процессах теплопроводности, нейтронный поток в ядерных реакциях, популяционная плотность в популяционной динамике и пр.

Далее описано построение семейства моделей роста–распространения (реакции–диффузии) с одной величиной $u(x, t)$ или $u(x)$, которую будем называть функцией плотности или субстанцией в момент времени t в точке x в диффузионной среде $\Omega \subset \mathbb{R}^n$. Закон сохранения гласит, что для любой подобласти $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ с границей S скорость изменения плотности равна скорости потока через границу S плюс скорость формирования внутри Ω . Это утверждение является отношением баланса, в котором поток, обозначаемый вектором J , представляет собой количество субстанции, пропускаемое через единицу поверхности в единицу времени.

Пусть ν — внешний единичный вектор нормали на границе S и q_0 — скорость формирования в единице объема (в двумерных соответственно площади, в одномерных — длины) в единицу времени в \mathbb{R}^n . Как обычно мы предполагаем, что и J и q_0 являются достаточно гладкими функциями и имеют все непрерывные (частные) производные, которые нам потребуются. Тогда соотношение баланса может быть записано в виде:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_R a_0 u \, dx = - \int_S J \cdot \nu \, ds + \int_R q_0 \, dx, \quad (1.1.1)$$

где a_0 — коэффициент пропорциональности, который зависит от типа рассматриваемой проблемы и отражает свойства диффузионной среды. В химических задачах, связанных с процессами реакции, a_0 — число Льюиса. В задачах теплопроводности a_0 — произведение плотности и удельной теплоемкости диффузионной среды. В гидродинамике и термодинамике число Льюиса представляет собой безразмерное число, определяемое как отношение коэффициента температуропроводности к коэффициенту массовой диффузии. Оно используется для характеристики потоков жидкости, в которых одновременно происходит тепло-массообмен. Число Льюиса определяет толщину теплового пограничного слоя по отношению к концентрационному пограничному слою. Знак «−» перед поверхностным интегралом отражает то, что направление потока противоположно вектору нормали.

По теореме Гаусса–Остроградского

$$\int_S J \cdot \nu \, ds = \int_R \nabla \cdot J \, dx,$$

где $\nabla = \left(\frac{\partial}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial}{\partial x_n} \right)$ — оператор Гамильтона. После этого соотношение (1.1.1) приведет к виду

$$\int_R \left(a_0 \frac{\partial u}{\partial t} + \nabla \cdot J - q_0 \right) dx = 0.$$

В силу произвольности подобласти \mathbb{R} и предположения о непрерывности подынтегральной функции в этом равенстве, мы получаем, что

$$a_0 \frac{\partial u}{\partial t} + \nabla \cdot J - q_0 = 0. \quad (1.1.2)$$

Чтобы связать диффузионный поток J с функцией плотности, нам потребуется дополнительный «физический» закон. Этот закон имеет вид:

$$J = -D^* \nabla u + \mu_0 u, \quad (1.1.3)$$

где D^* — строго положительная функция в Ω , μ_0 — скорость потока при на-

личии конвекции. Если конвекция отсутствует, то $\mu_0 = 0$. В теории теплопроводности равенство (1.1.3) называется законом Фурье, а в теории диффузии законом Фика, для моделей пористой среды — законом Дарси. В каждом случае закон гласит, что при отсутствии конвекции, поток пропорционален градиенту плотности, взятому со знаком «-». Коэффициент пропорциональности D^* характеризует проводимость среды. Подставляя выражение (1.1.3) в (1.1.2), мы получим уравнение

$$a_0 \frac{\partial u}{\partial t} = \nabla \cdot (D^* \nabla u) - \mu_0 \cdot \nabla u + q_0, \quad (1.1.4)$$

или в более традиционной форме

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{1}{a_0} \nabla \cdot (D^* \nabla u) - \mu \cdot \nabla u + q, \quad q = \frac{q_0}{a_0}, \quad \mu = \frac{\mu_0}{a_0}.$$

Слагаемое $1/a_0 \nabla \cdot (D^* \nabla u)$ представляет собой скорость изменения функции плотности по причине диффузии, q — скорость изменения благодаря реакции, $\mu \nabla u$ — конвективный член. Слагаемое q расценивается как количество субстанции, возникающее в единице объема в единицу времени благодаря процессу реакции или внутреннему взаимодействию. В моделях реакции-диффузии q зависит не только от точки и времени, но и от функции плотности, так что в общем случае $q = f(x, t, u)$, что приводит нас к общему виду однокомпонентного соотношения реакции-диффузии:

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \frac{1}{a_0} \nabla \cdot (D^* \nabla u) + \mu \cdot \nabla u = f(x, t, u). \quad (1.1.5)$$

В стационарных случаях для установившихся распределений субстанции $\partial u / \partial t = 0$, таких что функция u зависит только от x и соотношение (1.1.5) примет вид:

$$\frac{1}{a_0} \nabla \cdot (D^* \nabla u) - \mu \cdot \nabla u + f(x, u) = 0. \quad (1.1.6)$$

Мы далее предполагаем, что $\mu = 0$ (отсутствует конвекция), $f = f(u) = au(1 - Mu) - qu$.

Соотношение вида (1.1.5) без конвективного члена возникает при моделировании пространственно-временной динамики ядерного реактора с эффектом температурной обратной связи. В этом случае возникают спаренные соотноше-

ния

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} - \frac{1}{a_0} \nabla \cdot (D^* \nabla u) &= \sigma_a u f_0(u, v), \\ \rho c v_t &= \nu_0 \sigma_f u, \end{aligned} \tag{1.1.7}$$

здесь D^* — коэффициент диффузии, v — температура в реакторе, ρ — плотность, c — удельная теплоемкость, σ_a и σ_f — общее сечение и сечение деления соответственно, ν_0 — количество нейтронов, образующихся при делении. Функция f_0 отражает эффект обратной связи в системе реактора. Известно два вида обратной связи: адиабатическая обратная связь и оперативная обратная связь. Мы рассматриваем случай оперативной обратной связи. В этом случае функция f_0 не зависит от температуры v и как правило имеет вид $f_0 = a_1 - b_1 u$, где $a_1, b_1 > 0$ при отрицательной обратной связи. Подстановка такого вида функции f_0 в уравнение (1.1.7) приводит это уравнение к виду:

$$\frac{\partial u}{\partial t} - \frac{1}{a_0} \nabla \cdot (D^* \nabla u) = au(1 - Mu),$$

где $a = \sigma_a a_1, M = b_1/a_1$.

Модель Фишера развития полезных генов

Одной из моделей, описывающих популяционную динамику, является логистическое соотношение, предложенное бельгийским математиком П.Ф. Ферхюльстом в 1838г.:

$$\frac{du}{dt} = ru \left(1 - \frac{u}{S}\right),$$

где S — емкость среды. Диффузионно-логистическая модель, включающая как диффузионную, так и логистическую составляющую, была предложена Г. Хотеллингом в 1921 году:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = A(s - u)u + B \frac{\partial^2}{\partial x^2} u.$$

Входящие в соотношение величины имеют следующий смысл: A — темп роста популяции, B — темп распространения, s — коэффициент насыщенной плотности, u — плотность популяции, t — время.

Рассмотрим распределения популяции вдоль некоторой линейной области обитания, например, вдоль береговой линии. Пусть область обитания достаточ-

но велика по сравнению с расстоянием, отделяющим потомков от их родителей. Предположим, что в некоторой точке, рассматриваемой области происходит мутация, которая способствует выживаемости членов популяции. Распространение этой мутации происходит сначала в малую окрестность области обитания, а затем и на остальных членов популяции.

Пусть $u = u(x, t)$ — концентрация членов популяции с мутировавшим геном, $v = v(x, t)$ — концентрация членов популяции, потомки которых имеют мутировавший ген. В модели Фишера будем предполагать, что $v = 1 - u$. Пусть α — интенсивность отбора мутантного гена, не зависящая от $u(x, t)$. При малых значениях интенсивности α , популяционная концентрация с этим геном $u(x, t)$ меняется от поколения к поколению. Пусть доля поколения, которая уже проникла в общую популяцию, определяется выражением $k \frac{\partial u}{\partial x}$, $k > 0$ — постоянная диффузии, что соответствует закону диффузии, когда диффузия пропорциональна градиенту концентрации.

Если выполняются все эти предположения, то концентрация мутантного гена удовлетворяет соотношению [38]:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \alpha u(1 - u) + k \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}.$$

1.2. Основные численные методы для дискретизации континуальных моделей роста и распространения

Математическая модель роста–распространения обычно строится на основе уравнения реакции–диффузии Фишера–Колмогорова–Петровского–Пискунова (Ф–КПП)

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \nabla \cdot (D(x) \nabla u) + \rho u(1 - u), \quad (1.2.1)$$

где $u(\mathbf{x}, t)$ — плотность или концентрация формируемой субстанции, $D(\mathbf{x})$ — коэффициент диффузии (распространения), ρ — коэффициент, характеризующий собственную скорость роста. Уравнение (1.2.1) рассматривается в некоторой области G . Кроме того, ставятся дополнительные условия. Начальное

условие $u(\mathbf{x}, 0) = u_0(\mathbf{x})$, описывающее поддающееся измерению начальное распределение субстанции. В качестве граничных условий может ставиться:

— условие Дирихле $u(x, t)|_G = \phi(x, t)$, отражающее возможность измерения распределения субстанции на границе области;

— условие Неймана $\partial u(x, t)/\partial n|_G = \phi(x, t)$, отражающее возможность измерения потока субстанции через границу;

— условие третьего рода $(u(x, t) + \beta \partial u(x, t)/\partial n)|_G = \phi(x, t)$, отражающее возможность изменения плотности субстанции в рассматриваемой области за счет обмена с окружающей средой.

Для этой начально–краевой задачи явное представление известно лишь при уникальном сочетании начального и краевого условий. Поэтому роль численных методов очень велика.

Укажем основные виды численных методов дискретизации этой непрерывной модели.

1. Метод конечных разностей (МКР) на регулярных сетках для модельных задач с простой геометрией.

2. Метод конечных элементов (МКЭ).

3. Метод конечных объемов (МКО) для задач с сохранением массы.

Особый интерес в прикладных исследованиях вызывают нелинейные модели, в частности, со степенными нелинейностями, к которым, например, относится модель роста–распространения (реакции–диффузии).

В диссертации конечно–разностным методом построена дискретная модель для непрерывной модели с уравнением Фишера–Колмогорова–Петровского–Пискунова (Ф–КПП). Среди работ, посвященных разностным схемам для дифференциальных уравнений со степенной нелинейностью, следует отметить работы П.П. Матуса [85]– [87], в которых изучаются вопросы численной аппроксимации уравнения Ф–КПП, а также статью [31] с исследованием на устойчивость монотонных разностных схем для уравнения Ф–КПП. В последние годы стало ясно, что уравнение типа Ф–КПП также является инструментом моделирования роста и распространения глиомы [105]– [106].

Теория методов построения и исследования дискретных математических моделей с соотношениями без особенностей имеет долгую историю (см. например [2], [39], [51], [33], [11]) и во многих разделах приняла законченные очертания. То же можно сказать и о методах построения точного решения для моде-

лей с особенностями, в частности, для уравнений с оператором Бесселя. Особую роль в этом разделе сыграли работы И.А. Киприянова и его учеников ([15]-[19], [26]-[28], [36], [47], [53]), а также работы Б.М. Левитана [25], Я.И. Житомирского [7]. Что же касается сингулярных дискретных математических моделей, некоторая активизация исследований в этом направлении наблюдалась в 70-80-х годах 20 века (см. [34], [6], [12]-[14]). Между тем, сингулярные математические модели часто возникают в прикладных задачах, в которых наблюдается симметрия по группам переменных, а также в задачах с характеристиками сред со степенным вырождением.

Наиболее обширные результаты, полученные при численном решении, относятся к регулярным краевым задачам, порождаемым невырожденными уравнениями с гладкими коэффициентами. В связи с этим стоит отметить монографию Г.И. Марчука [29], книги С.Г. Михлина [34], [35], Ж.П. Обэна [37], Ф. Сьярле [48]. Арсенал приближенных методов для сингулярных моделей значительно скромнее. Для вырождающихся или сингулярных уравнений можно указать статьи Ю.Л. Гусмана и Л.А. Оганесяна [6], В.В. Катрахова и А.А. Катраховой [12], Г.А. Виноградовой [5].

Одной из рассматриваемых в диссертации моделей выступает соотношение параболического типа. Частью схемы решения является применение метода Бубнова–Галеркина на каждом временном слое с последующим использованием конечно–разностных схем. Данный подход изложен в монографии Г.И. Марчука и В.И. Агошкова [30].

Большое количество прикладных задач приводит к дифференциальным уравнениям математической физики с негладкими данными, которые обеспечивают существование решения только в обобщенном смысле. При этом ключевое значение приобретает вопрос принадлежности обобщенного решения некоторому классу, например, соболевскому классу W_p^k . Результаты исследований таких уравнений тесно связаны как с теорией разностных схем, так и с теорией метода конечных элементов, в которой построение разностных схем базируется на обобщенной постановке краевых задач. Исходя из того, что обобщенное решение определяется как функция, удовлетворяющая некоторому интегральному тождеству, в 1943 году Р. Курант [62] изложил метод построения дискретных схем как частный случай минимизации вариационного функционала по методу Ритца.

Большинство результатов в этой области идейно и методически тесно связаны с работами А.Н. Тихонова, А.А. Самарского и их учеников [41], [45], [50]-[51]. Им принадлежит развитие теории однородных разностных схем, сохраняющих сходимость на разрывных решениях. Для одномерных задач авторами с помощью естественных априорных оценок и представления погрешности аппроксимации в дивергентной форме были получены необходимые и достаточные условия сходимости в классе разрывных коэффициентов.

1.3. Моделирование роста и распространения ГЛИОМ

Необходимые сведения о глиоме

Рак — второе по распространённости смертельное заболевание в мире после болезней сердца [82], [94]. Раковая клетка развивается из нормальной клетки в результате генетических мутаций, которые приводят к аномальному изменению скорости клеточного деления. В частности, глиома — это быстро развивающийся вид рака головного мозга, известный своим агрессивным и диффузным поведением [104].

Глиома — собирательный нейроонкологический термин, означающий обширную группу первичных внутричерепных новообразований, берущих начало из глиальных клеток (нейроглии), которые выполняют опорную, трофическую и защитную функции по отношению к нейронам. Патогенез связан с неопластической трансформацией глиальных клеток, приводящей к их неконтрольной пролиферации. (см. [49])

Классификация по ВОЗ. Степень злокачественности устанавливается гистологически после биопсии или резекции.

I степень: Опухоли низкой степени злокачественности с медленным ростом и относительно доброкачественным течением. Высокая вероятность радикального излечения при хирургическом удалении (пример: пилоцитарная астроцитома).

II степень: Новообразования низкой степени злокачественности, но с инфильтративным характером роста и потенциалом к малигнизации.

III степень: Анапластические опухоли высокой степени злокачественности. Характеризуются быстрой пролиферацией, выраженной атипией клеток и

инфильтративным ростом. Требуют комбинированного лечения.

IV степень: Наиболее агрессивные и быстро прогрессирующие опухоли (глиобластома). Обладают крайне неблагоприятным прогнозом.

Диагностика

Диагностика МРТ с контрастным усилением — золотой стандарт нейровизуализации для оценки локализации, размеров, структуры и характера роста опухоли.

КТ — применяется в экстренных ситуациях или при противопоказаниях к МРТ.

Стереотаксическая биопсия — инвазивный метод верификации диагноза, позволяющий установить гистологический тип и степень злокачественности.

Неврологическое обследование — для объективной оценки неврологического статуса.

Прогностические данные

Прогноз напрямую коррелирует с гистологическим типом и степенью злокачественности по ВОЗ.

Опухоли I–II степени имеют относительно благоприятный прогноз с потенциально длительной выживаемостью после радикального лечения.

Опухоли III–IV степени (глиобластома) ассоциированы с неблагоприятным прогнозом. Медиана выживаемости при глиобластоме при проведении стандартного лечения составляет 12–15 месяцев, однако применение современных протоколов позволяет увеличить этот показатель у отдельных пациентов.

Развитие молекулярно-генетических исследований и появление новых терапевтических мишеней открывают перспективы для улучшения исходов заболевания.

Сведения о моделировании глиом

Диффузная инвазия, присущая глиоме, стала причиной нескольких исследований, направленных на изучение прогрессирования глиомы с помощью математических моделей, построенных на основе уравнений диффузии (см. [60], [107], [108]), целью которых было предсказать её пространственное и временное развитие.

Параллельно с определением характеристик опухоли прогнозирование её роста и распространения может дать полезную информацию о динамике заболевания, что может улучшить клинические результаты. В связи с этим в литера-

туре появилось несколько математических и вычислительных моделей, которые исследуют механизмы, управляющие прогрессированием и инвазией глиомы, с целью прогнозирования её дальнейшего пространственного и временного развития с учётом или без учёта влияния терапии [72]. Эти модели могут стать ценными инструментами, которые помогут в клинической практике подобрать оптимальное индивидуальное лечение, а также облегчат анализ медицинских исследований. Современные методы моделирования направлены либо на симуляцию поведения отдельных клеток, либо на моделирование опухоли клинически значимого размера с целью изучения увеличения объёма [63], [72]. Такие модели основаны на дискретном клеточном описании, которое имитирует рост клеток, или на континуальной структуре, которая описывает эволюцию локальной клеточной плотности и основана на уравнениях диффузии и реакции. Поскольку оба подхода выявляют определённые аспекты развития опухоли, но при этом имеют свои ограничения, были разработаны гибридные модели, сочетающие континуальное и дискретное описание переменных, но они всё ещё ограничены сложностью модели и неопределённостью при смешивании моделей. С другой стороны, многокомпонентная континуальная модель, по-видимому, эффективно описывает процесс размножения и распространения субпопуляций различных типов клеток, оставаясь при этом вычислительно эффективной [102].

Дискретные модели способны учитывать клеточные параметры и биологические закономерности, а также моделировать эффекты хемотаксиса, галлотаксиса, межклеточной адгезии и решать проблемы внутриклеточных процессов и межклеточной коммуникации. Раковые клетки обычно представлены векторами переменных, которые определяют их положение и скорость в пространстве и т. д. (см. [64], [73], [78]). Кроме того, эти модели позволяют легко описывать гетерогенные клеточные популяции. Однако они требуют больших вычислительных мощностей и не могут быть эффективно инициализированы для опухолей клинически значимого размера, которые уже состоят из более чем 1 миллиарда клеток. Дискретная модель, состоящая из 1000 миллиардов отдельных единиц, не под силу большинству компьютеров, даже при использовании простых алгоритмов взаимодействия [109]. Таким образом, такие модели подходят только для изучения небольших опухолей, размер которых ниже уровня клинического выявления.

Континуальные модели представляют собой альтернативный подход к

изучению динамики развития опухоли [94]. Вместо того, чтобы рассматривать каждую клетку как отдельную единицу, они представляют опухоль как пространственное распределение плотности клеток. В результате значительно снижаются требования к вычислительным ресурсам. Если популяция опухолевых клеток представлена в виде континуальной переменной, то на макроскопическом уровне система может быть описана как образец биологической ткани. Континуальные модели также способны учитывать динамические изменения химических компонентов (таких как глюкоза, кислород, малоновый диальдегид, химиотерапевтические препараты и т. д.) в тканях головного мозга. Кроме того, они могут учитывать неоднородность и анизотропию мозговой ткани. Однако они не способны, по крайней мере, на современном этапе, моделировать специфические клеточные факторы, такие как генетический отпечаток опухолевых клеток и прерывистые изменения, например изменения эпителия, важные для инвазии опухолевых клеток в прилегающие ткани. Кроме того, они менее эффективны, чем дискретные модели, в описании факторов клеточного масштаба, таких как хемотаксис, гаптотаксис и межклеточная адгезия [94].

Континуальные подходы чаще всего реализуются с помощью уравнений реакции–диффузии [71], где фактор пролиферации клеток выражается законом Гомпертца, полиномиальным уравнением второго порядка или простой линейной функцией [60], [100]. По всей видимости, работа [93] была одной из первых, где авторы первыми проанализировали взаимосвязь между клеточной кинетикой и ростом опухоли. Затем группа авторов [110] определила базовую пространственно–временную модель развития рака, которая по-прежнему основывалась на экспоненциальном законе деления клеток, но также учитывала клеточную диффузию [65]. Эта работа легла в основу наиболее широко используемой континуальной модели пролиферации–инвазии (PI), на основе которой было разработано множество других моделей [74].

Соотношение

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + au(1 - u), \quad (1.3.1)$$

основные параметры которого в общей ситуации будут описаны ниже, также может представлять собой математическую интерпретацию классического биологического определения рака как неконтролируемой пролиферации клеток с возможностью локальной инвазии и дистанционного метастазирования. Поскольку глиомы практически никогда не метастазируют, модель может быть

упрощена таким образом, что поведение отдельных глиом может быть определено двумя доминирующими факторами: чистыми темпами пролиферации ρ и инфильтрации или диффузии D . Одним из сильных моментов модели является то, что произведение этих двух темпов составляет основу известного приближения Фишера для предсказанной моделью постоянной скорости радиального расширения видимой опухоли: $v = 2\sqrt{D\rho}$ для оценки времени, необходимого для опухоли, чтобы расшириться от ее обнаруживаемого фактического размера при диагнозе до ее размера при смерти. На протяжении многих лет описанная модель изучалась как «уравнение КПП».

В рассматриваемой модели общее количество клеток глиомы, распределенных по всему мозгу, может удваиваться экспоненциально, скорость радиального роста видимой массы линейна и постоянна (не экспоненциальна), что приводит к наблюдаемой массе со средним радиусом, который растет примерно линейно со временем. Эта модель, объединяющая клеточную пролиферацию и инвазию в определении роста видимой (объемной) опухоли, делает классическую концепцию простого экспоненциального роста видимой массы (с постоянным временем удвоения объема) нереалистичной. Важным фактором является постоянная скорость радиального расширения, что приводит к линейному графику среднего радиуса визуализируемой опухоли во времени, несмотря на пространственную сложность, связанную с опухолями человеческого мозга. Скорость радиального расширения можно оценить по двум наборам магнитно-резонансных изображений (МРТ).

Весьма подробно достижения в области математического моделирования глиом подробно анализируются в [107]. Сначала описывается модель глиомы без лечения, а затем модели, включающие химиотерапию или хирургическую резекцию. Предположения, лежащие в основе моделирования, варьируются от относительно простых соображений, связанных с однородной тканью мозга, до тех, что касаются неоднородной ткани мозга с разной скоростью диффузии клеток глиомы в сером и белом веществе геометрически сложной области мозга. В подходе [100], разработанном для решения проблем, связанных с неоднородностью и анизотропией мозга, используется трёхмерная модель диффузии. В исследовании представлена математическая основа, включающая альтернативные схемы скорости пролиферации, а также решение уравнения диффузии с помощью различных численных методов конечных разностей. Проблемы, свя-

занные с неоднородностью и анизотропией мозга, рассматриваются в модели роста глиомы [101], который применяется к реальным данным. Пропорции белого и серого вещества, а также тензоры диффузии извлекаются с помощью атласов нормального мозга без обработки диффузионно-тензорной томографии. Исследование [69] подтверждает гипотезу о том, что изменение рН в микроокружении опухоли может быть важным механизмом инвазии рака. Другая реакционно-диффузионная модель, представленная в [67], описывает диффузионное поведение глиомы. Эта однородная модель включает в себя граничные условия Неймана, которые накладываются черепом на глиомы и особенно на мультиформную глиобластому (МГБ). В [103] исследуются вопросы роста и диффузии сфероидов глиобластомы U87. Модель включает в себя параметры диффузии, пролиферации и межклеточной адгезии, которые различаются для каждой клеточной линии. Клетки глиомы U87 также исследуются в [79], где представлена модель, учитывающая роль хемотаксиса, гаптотаксиса и адгезии. Согласно этой модели, миграция клеток сильно зависит от параметров адгезии, гаптоза и хемотаксиса, а также от фактора случайной диффузии.

Изначальные математические модели злокачественной опухоли строились по принципу систем со сосредоточенными параметрами. Следующий этап в области моделирования опухолей характеризуется применением систем с распределенными параметрами, т.е. моделями диффузия-адвекция-реакция. В связи с этим стоит отметить отечественных исследователей Н.М. Эмануэля [54], С.А. Астанина [3], А.В. Колобова [20]- [22], Е.П. Колпака и его учеников [1], [8], [9]. Среди современных зарубежных авторов изучением указанной проблематики занимались К.Р. Свансон [105]- [106], М. Пападогиоргаки [94], С. Летен [84] и другие.

Расширяя возможности континуальных математических моделей, некоторые исследователи также изучают механическое воздействие опухолевых клеток на поражённую ткань (см. [59] [58], [57], [60], [91], [92]). Во многих континуальных подходах для моделирования пролиферации раковых клеток используется экспоненциальный закон Гомпертца [97]. Согласно этому закону, темпы роста клеточных популяций высоки на ранних стадиях роста и снижаются на более поздних. Модели роста опухоли по Гомпертцу учитывают тот факт, что по мере увеличения размера опухоли скорость её роста снижается из-за уменьшения доступного пространства и ограниченного количества пита-

тельных веществ. Общая популяция клеток подчиняется модели роста по Гомпертцу в [81], где предлагается двухкомпонентная модель динамики популяции раковых клеток. Модель состоит из набора обыкновенных дифференциальных уравнений, которые моделируют популяции пролиферирующих и покоящихся клеток, включая скорости перехода между ними.

Следующий этап в моделировании глиомы — разработка гибридных моделей, позволяющих преодолеть некоторые ограничения отдельных подходов. В этих моделях используется континуальный метод для моделирования микроокружения опухоли, а межклеточные взаимодействия реализуются с помощью дискретного подхода (см. [55], [56], [70], [76], [80], [96], [109], [99]). Некоторые из этих моделей являются многомасштабными и включают в себя молекулярный и клеточный уровни (см. [68], [77], [88], [98]). Однако гибридные модели по-прежнему ограничены возможностями дискретных моделей, в которых не учитываются связи на тканевом уровне, и требуют значительных вычислительных ресурсов.

Многокомпонентные континуальные модели представляют собой альтернативные континуальные подходы, которые, как ожидается, позволят преодолеть некоторые ограничения традиционного моделирования и будут способны учитывать гетерогенную внеклеточную матрицу [61]. Согласно этой модели, клетки группируются по фенотипу в зависимости от их доступа к необходимым питательным веществам или уровня дифференцировки [89]. Такие подходы эффективны с точки зрения вычислений и позволяют описать, как размножаются и распространяются субпопуляции различных типов клеток. Инвазия, пролиферация, изменения фенотипа и некроз легко выражаются в виде увеличения или уменьшения плотности клеток в каждом компартменте. В [107] предлагается континуальная многокомпонентная модель, изучающая взаимодействие опухолевых клеток с их тканевым микроокружением. С помощью уравнений диффузии были реализованы дисперсионные и интерактивные популяционные изменения нормоксических и гипоксических клеток глиомы, эндотелиальных клеток сосудов, диффузных ангиогенных факторов и некротических клеток. Кроме того, исследование показало, как различные скорости пролиферации и диффузии клеток глиомы приводят к увеличению количества митозов, неоангиогенезу, вызванному гипоксией, и некрозу — признакам, характерным для разных стадий глиомы.

В работе [94] предложена новая непрерывная трехмерная сферическая и многокомпарментная математическая модель роста бессосудистой глиомы в изотропной и гомогенной среде. Эта модель расширяет мультикомпарментный подход [107] путем интеграции нового клеточного компармента, который представляет популяцию гипогликемических клеток. Первоначальная модель дополнительно расширяется за счет использования переменных микросреды гибридного подхода в [56], где помимо кислорода вводится второе жизненно важное питательное вещество — глюкоза. Кроме того, модель учитывает влияние ткани-хозяина, то есть внеклеточного матрикса (ВКМ), матрикс-деградирующих ферментов (МДФ) и питательных веществ (кислорода и глюкозы), на пролиферацию и инвазию опухолевых клеток через различные компарменты микроокружения. В предлагаемом подходе используются континуальные переменные (плотность клеток, концентрация химических компонентов), подчиняющиеся принципам диффузии. Он учитывает влияние концентрации обоих важных питательных веществ в то время как большинство существующих подходов рассматривают одно питательное вещество, чаще всего кислород (см. [56], [59], [57], [68], [76], [79], [83], [96], [109]).

На современном этапе наметилась тенденция смещения исследований от теоретических изысканий к созданию комплексных, персонализированных и клинически применимых инструментов. Можно выделить несколько ключевых направлений.

Основное направление — калибровка моделей на данных конкретного пациента для прогнозирования роста опухоли и оценки эффективности лечения: МРТ-изображений до оценки параметров — коэффициентов инвазии D и пролиферации ρ и использования модели для прогноза. Подчеркивается трансляционный потенциал моделей как основы для систем поддержки принятия врачебных решений (CDSS).

Модель реакции–диффузии может быть использована для оптимизации планов терапии. Модель позволяет прогнозировать зоны повышенного риска рецидива, что потенциально позволяет адаптировать дозы облучения под индивидуальные паттерны инвазии опухоли.

Для преодоления вычислительных ограничений традиционных методов калибровки сложных моделей используется машинное обучение.

В работе [90] приведен специфический обзор как теоретических, так и

натурных исследований, направленный на укрепление тезиса о том, что для корректного использования реакционно–диффузионной модели роста и распространения глиомы требуется корректное определение ее входных параметров — коэффициентов инвазии D и пролиферации ρ по данным МРТ. Для этого авторы используют глубокое обучение.

Таким образом, развитие применения уравнений реакции–диффузии в моделировании глиомы характеризуется переходом к созданию комплексных, клинически ориентированных инструментов.

Современные исследования направлены на трансформацию математических моделей из чисто академического инструмента в неотъемлемый компонент будущего персонализированной онкологии.

Мотивация и оправданность замены многомерного уравнения реакции-диффузии на одномерное при моделировании глиомы

Замена многомерной (2D/3D) модели на одномерную (1D) является стратегической редукцией, направленной на преодоление фундаментальных практических ограничений при сохранении адекватной прогностической способности модели для специфического биологического поведения глиом. Это оправдано следующими ключевыми факторами.

1. Вычислительная эффективность и скорость (главный практический мотив).

Проблема многомерных моделей: Численное решение 2D/3D-уравнений в персонализированной постановке (с учетом анатомии мозга пациента) требует дискретизации сложной геометрической области на миллионы узлов сетки. Процесс калибровки (решение обратной задачи) для подбора параметров (D — коэффициент диффузии, ρ — коэффициент пролиферации) под данные конкретного пациента требует тысяч итераций решения прямой задачи. Это делает процесс чрезвычайно ресурсоемким и времязатратным (часы или дни вычислений на кластере), что неприемлемо для клинической практики.

Преимущество одномерной модели: 1D-модель радикально сокращает вычислительную сложность, уменьшая количество узлов сетки на порядки. Это позволяет калибровать модель и строить прогноз на стандартном персональном компьютере за секунды или минуты, что открывает путь к использованию в системах поддержки принятия врачебных решений в режиме, близком к реальному времени.

Проблема «вычислительного барьера» на пути клинической трансляции сложных моделей является крайне актуальной. Одной из ключевых стратегий для преодоления этого барьера и создания работающих систем поддержки принятия решений является редукция модели до 1D вдоль основного направления инвазии.

2. Биологическое обоснование: фенотропная инвазия вдоль трактов белого вещества. Упрощение физически обоснованно для глиомы и не является чисто математической абстракцией.

Клетки глиомы демонстрируют ярко выраженный фенотропизм — свойство инвазировать преимущественно вдоль предварительно существующих анатомических структур, а именно путей белого вещества (аксональных трактов).

Во многих областях мозга (мозолистое тело, дугообразные пучки, капсула) эти тракты имеют четко выраженную преимущественную ориентацию. Таким образом, на макроуровне рост опухоли в определенных областях часто можно аппроксимировать как распространение вдоль одного главного направления.

Одномерная модель адекватно описывает этот доминирующий механизм инвазии, фокусируясь на оценке скорости и протяженности распространения вдоль выбранного направления, что часто является ключевым для прогноза и планирования лечения.

Для целей планирования лучевой терапии критически важна скорость получения прогноза, поэтому упрощенные модели, адекватно описывающие ключевые биомеханизмы (инвазия и пролиферация), являются оптимальным компромиссом между точностью и скоростью, делая персонализированное планирование возможным на практике.

3. Устойчивость и идентифицируемость параметров.

Проблема многомерных моделей: Задача оценки параметров в 3D-модели, особенно с анизотропным коэффициентом диффузии $D(x, y, z)$, является сильно переопределенной. Ограниченный объем данных МРТ (обычно два временных среза для калибровки) не позволяет однозначно определить большое количество параметров, что приводит к неустойчивости решения и проблеме неединственности.

Преимущество одномерной модели: 1D-модель имеет минимальное количество параметров (часто всего два: D и ρ для всего домена или его частей).

Это делает задачу их оценки значительно более устойчивой, надежной и гарантирует, что найденное решение является физически интерпретируемым.

4. Практическая применимость и интерпретируемость. Простота модели делает ее результаты наглядными для клиницистов. Врач может легко оперировать понятиями «скорость распространения» (D , мм²/год) и «скорость роста» (ρ , 1/год), полученными для конкретного пациента.

Высокая скорость расчета позволяет проводить анализ чувствительности, оценивать неопределенность параметров и строить множественные прогнозные сценарии для оценки рисков и планирования терапии. Вдоль преимущественных направлений инвазии (напр., через мозолистое тело) одномерная модель обеспечивает сопоставимую точность прогноза при радикальном сокращении времени расчета, что критически важно для интеграции в клинические контуры.

Таким образом, замена многомерной модели на одномерную является оправданной редукцией, которая:

1. Биологически обоснована фенотропным характером инвазии глиомы.
2. Крайне необходима для преодоления вычислительных барьеров и делает возможной быструю персонализацию модели в клинических временных рамках.

3. Сохраняет прогностическую способность для оценки скорости и направления распространения опухоли, что зачастую является главной целью моделирования.

4. Позволяет внедрять математическое моделирование в реальную клиническую практику в качестве инструмента поддержки принятия решений для планирования хирургического вмешательства, лучевой терапии и прогнозирования исхода.

Кроме того, вычислительная эффективность достигается за счет построенной разностной схемы, приводящей к системе линейных алгебраических уравнений, решение которых возможно методом прогонки.

Метод прогонки представляет собой эффективный алгоритм численного решения линейных систем уравнений с трехдиагональной матрицей коэффициентов. Этот метод обладает рядом важных преимуществ перед нелинейными методами, такими как итерационные методы Гаусса-Зейделя или Якоби, особенно в применении к большим системам уравнений, возникающим в физических

и инженерных расчетах.

Преимущества метода прогонки:

1. Высокая вычислительная эффективность. Метод прогонки позволяет решить систему уравнений за минимальное количество операций $O(n)$. Это достигается благодаря специфической структуре матрицы (только три диагонали заполнены значениями).

2. Устойчивость и точность. Для линейных систем с хорошо обусловленной диагонально доминирующей матрицей метод прогонки гарантирует устойчивость и высокую точность решений. Напротив, многие нелинейные методы имеют проблемы сходимости и нуждаются в тщательном выборе начальных приближений, что увеличивает риск расхождения или неверных результатов.

3. Отсутствие проблем с выбором начального приближения. Нелинейные методы часто зависят от выбора подходящего начального приближения, что влияет на скорость сходимости и конечный результат. В отличие от них, метод прогонки является прямым методом, не зависящим от начальной точки, что упрощает процесс программирования и повышает надежность алгоритма.

4. Легкость реализации. Алгоритм прогонки прост в реализации и не требует сложных структур данных или продвинутых методов оптимизации. Его реализация занимает значительно меньше строк программного кода по сравнению с итерационными методами, что облегчает поддержку и модификацию программы.

5. Эффективность параллельных вычислений. Хотя прямой ход метода прогонки имеет последовательную природу, обратный ход допускает эффективное распараллеливание. Это свойство становится важным преимуществом при решении больших систем уравнений на современных многоядерных системах и суперкомпьютерах.

Таким образом, метод прогонки демонстрирует ряд существенных преимуществ над нелинейными методами, обеспечивая быстрое, точное и надежное решение широкого класса практических задач, включая конечно-разностные схемы решения дифференциальных уравнений в частных производных, расчеты теплообмена, гидродинамические модели и многое другое.

Общая нелинейная модель роста–распространения глиомы

К концу 1990-х – началу 2000-х годов сложилось понимание континуальной модели роста глиомы, основанной на уравнении реакции–диффузии

(модель пролиферации–инвазии, PI-model), расцениваемой теперь как классическая. Она описывает динамику плотности опухолевых клеток $u(x, t)$ (клетки/мм³) клеток глиомы в любой точке x в момент времени t уравнением:

$$a_0 \frac{\partial u}{\partial t} = \nabla \cdot (D(x) \nabla u) + \rho u \left(1 - \frac{u}{K}\right), \quad (1.3.2)$$

где D (мм²/год) представляет собой чистую скорость миграции клеток глиомы в недифференцированной мозговой ткани, параметр ρ (1/год) представляет собой чистую скорость пролиферации или увеличения числа опухолевых клеток. K обозначает емкость ткани, устанавливающую верхний предел на количество опухолевых клеток, способных занимать любой кубический миллиметр мозга. Кроме того, входящие в соотношение (1.3.2) слагаемые, имеют следующие размерности: $[u] = \text{клетки/мм}^3$, $[\nabla u] = \text{клетки/мм}^4$, $[D \nabla u] = \text{клетки} / (\text{мм}^2 \cdot \text{год})$, $[\nabla D \nabla u] = \text{клетки} / (\text{мм}^3 \cdot \text{год})$, $[\partial u / \partial t] = \text{клетки} / (\text{мм}^3 \cdot \text{год})$, $[a_0] = 1$ безразмерное, $[1 - u/K] = 1$ безразмерное.

Тогда скорость изменения концентрации клеток глиомы равна чистому рассеянию клеток глиомы плюс чистая пролиферация клеток глиомы. На основе данных, полученных из магнитно–резонансных изображений, рассчитывается «индекс невидимости» D/ρ . А именно, составляются два уравнения с двумя неизвестными, D и ρ , одно из которых связано с произведением, а другое с отношением, откуда и находят D и ρ .

Уравнение (1.3.2) математически подразумевает, что «край» видимой опухоли продвигается асимптотически как «движущаяся волна», которая расширяется радиально и линейно. Пролиферация ρ стремится поднимать волну (но не выше емкости K), а дисперсия D стремится двигать градиент центрифугально.

Предположим, что в уравнении (1.3.2) присутствует сферическая симметрия, т.е. $u = u(r)$, где $r = |x| = \sqrt{\sum_{k=1}^n x_k^2}$. Тогда рассмотрим оператор

$$Lu = \text{div}(D(r) \nabla u),$$

где

$$D(r)\nabla u = \left(D\frac{\partial u}{\partial x_1}, \dots, D\frac{\partial u}{\partial x_n} \right),$$

$$\frac{\partial u}{\partial x_j} = \frac{du}{dr} \frac{\partial r}{\partial x_j} = \frac{du}{dr} \frac{x_j}{r},$$

$$\begin{aligned} Lu &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left(D\frac{\partial u}{\partial x_j} \right) = D\frac{\partial^2 u}{\partial x_j^2} + \frac{\partial D}{\partial x_j} \frac{\partial u}{\partial x_j} = D\frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{du}{dr} \frac{x_j}{r} \right) + \\ &+ \frac{dD}{dr} \frac{\partial r}{\partial x_j} \frac{du}{dr} \frac{x_j}{r} = D\frac{d^2 u}{dr^2} \frac{x_j^2}{r^2} + D\frac{r - x_j^2/r}{r^2} + \frac{dD}{dr} \frac{du}{dr} \frac{x_j^2}{r^2} = \\ &= D\frac{d^2 u}{dr^2} \frac{x_j^2}{r^2} + D\frac{r^2 - x_j^2}{r^3} + \frac{dD}{dr} \frac{du}{dr} \frac{x_j^2}{r^2}, \end{aligned}$$

$$Lu = D\frac{d^2 u}{dr^2} + \frac{du}{dr} \left(D\frac{n-1}{r} + \frac{dD}{dr} \right) = r^{1-n} \frac{d}{dr} \left(r^{n-1} D(r) \frac{du}{dr} \right)$$

Таким образом, уравнение (1.3.2) примет вид:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{r^{1-n}}{a_0} \frac{d}{dr} \left(r^{n-1} D(r) \frac{du}{dr} \right) + \frac{\rho}{a_0} u \left(1 - \frac{u}{K} \right). \quad (1.3.3)$$

Сделаем замену переменных $r^{1-n}/a_0 = r^{-\gamma}, r^{n-1}D(r) = r^\gamma p_0$. Тогда $a_0 = r^{\gamma+1-n}$, $D = r^{\gamma+1-n} p_0$, $\rho/a_0 = \rho r^{n-1-\gamma}$.

Примем $n = 3$, получим $a_0 = r^{\gamma-2}$, $D = r^{\gamma-2} p_0$, $\rho/a_0 = \rho r^{2-\gamma}$.

$$\frac{\partial u}{\partial t} = r^{-\gamma} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^\gamma p_0 \frac{\partial u}{\partial r} \right) + \rho r^{2-\gamma} u \left(1 - \frac{u}{K} \right),$$

или же

$$\frac{\partial u}{\partial t} = r^{-\gamma} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^\gamma p_0 \frac{\partial u}{\partial r} \right) + \rho_0 u \left(1 - \frac{u}{K} \right), \quad (1.3.4)$$

где $\rho r^{2-\gamma} = \rho_0$,

Перейдем от (1.3.4) к соотношению, содержащему безразмерную функцию u , отражающую долю насыщения (какое количество насыщения составляет текущее состояние).

Для этого примем две замены переменных $v = u/K$ и $\theta = p_0 t$. Получим уравнение

$$\frac{\partial v}{\partial \theta} = r^{-\gamma} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^{\gamma} \frac{\partial v}{\partial r} \right) + \frac{\rho_0}{p_0} v(1 - v). \quad (1.3.5)$$

Входящие в соотношение (1.3.5) слагаемые, имеют следующие размерности: $[v] = 1$ безразмерное, $[\partial^2 v / \partial r^2] = 1/\text{мм}^2$, $[\partial v / \partial \theta] = 1/\text{мм}^2$, $[v(1 - v)] = 1$ безразмерное, $[\rho_0 / p_0] = 1/\text{мм}^2$.

Случай $\gamma = 2$ соответствует сферической симметрии, $\gamma = 0$ приводит к замене оператора Бесселя на вторую производную.

Уравнение (1.3.5) с соответствующими начальным

$$v \Big|_{\theta=0} = v_0(r),$$

с краевыми условиями

$$\begin{aligned} \frac{\partial v}{\partial r} \Big|_{r \rightarrow +0} &= 0, \\ u \Big|_{r=1} &= \mu(\theta) \end{aligned}$$

и его модификации при различных соотношениях параметров являются основным объектом исследования в настоящей работе.

Особо выделим случай $n = 1$, $a_0 = x^{\gamma}$, $\gamma > 0$, $D^* = x^{\gamma} p(x)$. Тогда соотношение (1.1.5) при $\mu = 0$, $f = f(u) = au(1 - Mu) - qu$ имеет вид:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = x^{-\gamma} \frac{\partial}{\partial x} \left(x^{\gamma} p(x) \frac{\partial u}{\partial x} \right) - q(x)u + au(1 - Mu). \quad (1.3.6)$$

Далее считаем, что $x > 0$. Равенство $a_0 = x^{\gamma}$ означает, что коэффициент a_0 к левой границе промежутка изменения пространственной переменной ставится ничтожно малым, т.е. через левый конец этого промежутка не происходит обмена субстанцией с окружающей средой. Это неизменно ведет к краевому условию $\frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{x=0}$, где символическая запись означает предельный переход $x \rightarrow 0+$. Если $p(x) \geq p_0 > 0$, то в равенстве $D^* = x^{\gamma} p(x)$ отражается факт ничтожно малой диффузии вблизи левого конца промежутка.

Следует отметить, что случай $a_0 = x^{\gamma}$, $D^* = x^{\gamma}$ может возникнуть и в ситуации, когда рассматриваемый процесс обладает осевой при $n = 3$ или центральной симметрией (тогда $\gamma = 1$), либо сферической симметрией при $n = 3$ (тогда $\gamma = 2$).

Далее нас будут интересовать сначала различные частные случаи модели (1.3.6), для каждого из них мы построим сеточную дискретизацию модели (дискретную модель), а затем объединим все разнообразные случаи. При отсутствии реакции установившееся распределение будет удовлетворять соотношению

$$x^{-\gamma} \frac{d}{dx} (x^{\gamma} p(x)) - q(x)u = -f(x).$$

Диффузионный процесс без реакции (роста) описывается соотношением:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = x^{-\gamma} \frac{\partial}{\partial x} (x^{\gamma} p(x)) - q(x)u + f(x, t).$$

При постоянных коэффициентах a_0 , D^* при наличии реакции получаем соотношение (после надлежащей замены переменных)

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + au(1 - Mu).$$

Для общей модели (1.3.6) мы строим дискретную модель с учетом всех разнообразных частных случаев.

1.4. Выводы. Цель и задачи исследования

Анализ существующих нелинейных математических моделей роста и распространения, а также методов их дискретизации позволяет сделать вывод о необходимости создания новых эффективных методов дискретизации, численных методов, алгоритмов их применения, позволяющих упростить и ускорить компьютерную обработку данных первичных измерений. В связи с этим имеет смысл сформулировать следующие цели и задачи исследования.

Цель диссертационной работы — разработка, обоснование и тестирование эффективных вычислительных методов дискретизации непрерывных нелинейных математических моделей роста и распространения с применением современных компьютерных технологий.

Задачами, порожденными сформулированной целью, являются:

1. Построение, математическое обоснование и численная реализация эффективных линейных конечно-разностных схем для непрерывной нелинейной модели роста и распространения с применением современных компьютерных

технологий.

2. Разработка новой дискретной математической модели и эффективного численного метода дискретизации непрерывной сингулярной модели распространения. Разработка и обоснование эффективных вычислительных методов для дискретизации плоской стационарной сингулярной модели распределения субстанции.

3. Создание комплекса программ для исследования проблемы роста и распространения с применением разработанной в рамках диссертации технологии дискретного математического моделирования и проведения вычислительного эксперимента. [section]

Глава 2.

Дискретизация нелинейной математической модели роста–распространения

В настоящей главе в области Ω рассматривается класс математических моделей, основу которых составляет уравнение Хотеллинга

$$\frac{\partial u}{\partial t} = A(s - u)u + B \frac{\partial^2 u}{\partial x^2},$$

где u — искомая функция, $u = u(x, t) \in C^2(\Omega) \cap C^1(\bar{\Omega})$ при каждом $t > 0$, A , B , s суть заданные положительные постоянные. Известно, что данное уравнение описывает рост и распространение популяции. Кроме того, как было указано во введении, это уравнение описывает процессы реакции–диффузии и было исследовано А.Н. Колмогоровым с соавторами и Р. Фишером. Это и вызвало использование различных наименований уравнения.

Входящие в соотношение величины имеют следующий смысл: A — темп роста популяции, B — темп распространения, s — коэффициент насыщенной плотности, u — плотность популяции, t — время.

Эта модель была предложена (по сведениям, содержащимся в [40] — см. список литературы там) Хотеллингом в 1921 году как модель роста и распространения человеческих популяций. Основной недостаток модели Хотеллинга заключается в том, что запас средств существования принимается за постоянную величину, которая не зависит от времени и численности населения (рабочей

силы). Уникальность человеческой цивилизации заключается в её способности к длительному устойчивому развитию в отличие от биологических закономерностей, управляющих животными популяциями.

Отсюда следует, что эта модель больше подходит для животных популяций, что и было продемонстрировано спустя 30 лет после создания модели ее успешным применением в экологии.

2.1. Построение разностной схемы для уравнения роста–распространения. Порядок аппроксимации

Рассмотрим в прямоугольнике

$$\bar{D} = \{0 \leq x \leq 1, 0 \leq t \leq T\}$$

начально–краевую задачу для одномерного уравнения Фишера–Колмогорова–Петровского–Пискунова:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + Au(1 - u), 0 < x < 1, 0 < t \leq T, A > 0. \quad (2.1.1)$$

Зададим неоднородные граничные условия:

$$u(0, t) = u_1(t), u(1, t) = u_2(t), 0 \leq t \leq T, \quad (2.1.2)$$

и начальное условие:

$$u(x, 0) = u_0(x), 0 \leq x \leq 1. \quad (2.1.3)$$

Далее будем предполагать неотрицательность начально–краевых условий (2.1.2)-(2.1.3).

Разобьем отрезки $[0, 1]$ оси Ox и $[0, T]$ оси Ot соответственно на N и M частей. Введем сетку с постоянными шагами $h = 1/N$ и $\tau = T/M$:

$$\bar{w}_{h\tau} = \bar{w}_h \times w_\tau = \{x_i = ih, i = 0, 1, \dots, N\} \times \{t_j = j\tau, j = 0, 1, \dots, M\},$$

ω_h — множество внутренних узлов, γ_h — множество граничных узлов, $\bar{\omega}_h = \omega_h \cup \gamma_h$.

Значение сеточной функции y в узле (x_i, t_j) будем обозначать y_i^j . Для аппроксимации оператора $L = \frac{\partial}{\partial t} - \frac{\partial^2}{\partial x^2}$ используем шеститочечный шаблон, состоящий из узлов

$$(x_{i\pm 1}, t_{j+1}), (x_i, t_{j+1}), (x_{i\pm 1}, t_j), (x_i, t_j)$$

с центром в точке (x_i, t_{j+1}) . Проведем разностную аппроксимацию: заменим $\partial u / \partial t$ первой разностной производной, а $\partial^2 u / \partial x^2$ — второй разностной производной.

Обозначая

$$\Lambda y_i = \frac{y_{i-1} - 2y_i + y_{i+1}}{h^2}$$

и вводя произвольные вещественные параметры $\sigma, \eta, \alpha, \beta$, получим семейство дискретных моделей (разностных схем) с весами:

$$\frac{y_i^{j+1} - y_i^j}{\tau} = \Lambda(\sigma y_i^{j+1} + \eta y_i^j) + \alpha(1 - y_i^j)y_i^{j+1} + \beta(1 - y_i^{j+1})y_i^j, \quad (2.1.4)$$

где $0 < i < N, 0 \leq j < M$. Начальные и краевые условия аппроксимируем точно

$$y_0^j = u_1^j, y_N^j = u_2^j, \quad (2.1.5)$$

$$y_i^0 = y(x_i, 0) = u_0(x_i). \quad (2.1.6)$$

Следуя Самарскому [42], будем использовать безындексные обозначения

$$y_i^j = y, y_i^{j+1} = \hat{y}, y_t = \frac{\hat{y} - y}{\tau}.$$

Для определения погрешности введенной схемы необходимо оценить разность решения y_i^j задачи (2.1.4)-(2.1.6) и непрерывной функции $u = u(x, t)$, являющейся решением задачи (2.1.1)-(2.1.3), в узлах сетки:

$$z_i^j = y_i^j - u_i^j.$$

Запишем задачу (2.1.4)-(2.1.6) в бызындексном виде

$$\begin{cases} y_t = \Lambda(\sigma\hat{y} + \eta y) + \alpha(1 - y)\hat{y} + \beta(1 - \hat{y})y, (x, t) \in w_{h\tau}, \\ y(0, t) = u_1(t), y(1, t) = u_2(t), t \in w_\tau, \\ y(x, 0) = u_0(x), x \in \bar{w}_h. \end{cases} \quad (2.1.7)$$

Подставляя $y = z + u$ в (2.1.7), перейдем к задаче для z :

$$\begin{cases} z_t = \Lambda(\sigma\hat{z} + \eta z) + \alpha(1 - z)\hat{z} + \beta(1 - \hat{z})z + \psi, (x, t) \in w_{h\tau}, \\ z(0, t) = z(1, t) = 0, t \in w_\tau, \\ z(x, 0) = 0, x \in \bar{w}_h, \end{cases}$$

где функция $\psi(x, t)$, называемая невязкой схемы на решении, определяется равенством

$$\psi = \Lambda(\sigma\hat{u} + \eta u) - u_t + \alpha(1 - u)\hat{u} + \beta(1 - \hat{u})u.$$

Учитывая линейность оператора Λ , запишем невязку в виде

$$\psi = \sigma\Lambda\hat{u} + \eta\Lambda u - u_t + \alpha(1 - u)\hat{u} + \beta(1 - \hat{u})u.$$

Будем считать функцию $u(x, t)$ достаточно гладкой. Выпишем соотношения, полученные с помощью разложения в ряд Тейлора в окрестности узла (x_i, t_j) :

$$\hat{u} = u(x, t + \tau) = u(x, t) + \tau u'_t + \frac{\tau^2}{2!} u''_t + \frac{\tau^3}{3!} u^{(3)}_t + \frac{\tau^4}{4!} u^{(4)}_t + O(\tau^5),$$

$$u(x + h, t) = u(x, t) + h u'_x + \frac{h^2}{2!} u''_x + \frac{h^3}{3!} u^{(3)}_x + \frac{h^4}{4!} u^{(4)}_x + O(h^5),$$

$$u(x - h, t) = u(x, t) - h u'_x + \frac{h^2}{2!} u''_x - \frac{h^3}{3!} u^{(3)}_x + \frac{h^4}{4!} u^{(4)}_x + O(h^5).$$

Тогда

$$\Lambda u = \frac{u(x - h, t) - 2u(x, t) + u(x + h, t)}{h^2} = u''_x + \frac{h^2}{12} u^{(4)}_x + O(h^4),$$

$$u_t = \frac{\hat{u} - u}{\tau} = \frac{1}{\tau} \left(u + \tau u'_t + O(\tau^2) - u \right) = \frac{1}{\tau} \left(\tau u'_t + O(\tau^2) \right) = u'_t + O(\tau).$$

Обозначим $\partial^2 u / \partial x^2 = Lu$ и $u'_t = \dot{u}$, перепишем выражение для невязки

$$\begin{aligned} \psi &= \sigma \Lambda (u + \tau \dot{u} + O(\tau^2)) + \eta \left(Lu + \frac{h^2}{12} L^2 u + O(h^4) \right) - \dot{u} + O(\tau) + \phi = \\ &= \sigma Lu + \eta Lu - \dot{u} + O(h^2 + \tau) + \phi, \\ &\qquad \qquad \qquad \phi = \alpha(1 - u)\hat{u} + \beta(1 - \hat{u})u. \end{aligned} \quad (2.1.8)$$

Поскольку $\dot{u} = Lu + Au(1 - u)$, то при подстановке $Lu = \dot{u} - Au(1 - u)$ в (2.1.8), получим

$$\psi = \dot{u}(\sigma + \eta - 1) - Au(\sigma + \eta)(1 - u) + \alpha(1 - u)\hat{u} + \beta(1 - \hat{u})u + O(h^2 + \tau).$$

Положим $\sigma + \eta - 1 = 0$, тогда используя разложение функции $\hat{u} = u + \tau \dot{u} + O(\tau^2) = u + O(\tau)$, запишем невязку:

$$\begin{aligned} \psi &= -Au(1 - u) + \alpha(1 - u)u + \beta(1 - u)u + O(h^2 + \tau) = \\ &= u(-A + \alpha + \beta) + u^2(A - \alpha - \beta) + O(h^2 + \tau). \end{aligned}$$

Отсюда очевидно, что при выполнении условий

$$\begin{cases} \sigma + \eta = 1, \\ \alpha + \beta = A, \end{cases} \quad (2.1.9)$$

погрешность аппроксимации будет определяться равенством

$$\psi = O(h^2 + \tau).$$

Таким образом, схема обладает первым порядком аппроксимации по τ и вторым по h .

Далее будем полагать $0 < \sigma < 1$, $A/2 < \beta < A$.

2.2. Решение системы линейных алгебраических уравнений дискретной модели роста–распространения

Для схемы (2.1.4), удовлетворяющей условиям (2.1.9), запишем разностное уравнение

$$\frac{y_i^{j+1} - y_i^j}{\tau} = \sigma \frac{y_{i-1}^{j+1} - 2y_i^{j+1} + y_{i+1}^{j+1}}{h^2} + (1 - \sigma) \frac{y_{i-1}^j - 2y_i^j + y_{i+1}^j}{h^2} + (A - \beta)(1 - y_i^j)y_i^{j+1} + \beta(1 - y_i^{j+1})y_i^j, \quad 1 \leq i \leq N - 1, j \geq 0. \quad (2.2.1)$$

Преобразуем равенство:

$$\frac{y_i^{j+1} - y_i^j}{\tau} = \frac{\sigma}{h^2} (y_{i-1}^{j+1} - 2y_i^{j+1} + y_{i+1}^{j+1}) + \frac{(1 - \sigma)}{h^2} (y_{i-1}^j - 2y_i^j + y_{i+1}^j) + y_i^j \beta + y_i^{j+1} (A - \beta - Ay_i^j).$$

Сгруппируем значения функции по слоям:

$$\frac{\sigma}{h^2} y_{i-1}^{j+1} + y_i^{j+1} \left(\frac{-2\sigma}{h^2} + (A - Ay_i^j - \beta) - \frac{1}{\tau} \right) + \frac{\sigma}{h^2} y_{i+1}^{j+1} = \phi_i^j,$$

где

$$\phi_i^j = y_i^j \left(\frac{-1}{\tau} - \beta \right) + \frac{(\sigma - 1)}{h^2} (y_{i-1}^j - 2y_i^j + y_{i+1}^j).$$

Умножим обе части уравнения на $\frac{h^2}{\sigma}$:

$$y_{i-1}^{j+1} + y_i^{j+1} \left(-2 + \frac{h^2}{\sigma} (A - Ay_i^j - \beta) - \frac{h^2}{\sigma\tau} \right) + y_{i+1}^{j+1} = \frac{h^2}{\sigma} \phi_i^j,$$

$$\frac{h^2}{\sigma} \phi_i^j = y_i^j \left(-\frac{h^2}{\sigma\tau} - \frac{h^2}{\sigma} \beta \right) + \frac{\sigma - 1}{\sigma} (y_{i-1}^j - 2y_i^j + y_{i+1}^j).$$

Обозначим $\theta = \frac{h^2}{\sigma}$:

$$\underbrace{1}_{A_i} y_{i-1}^{j+1} + y_i^{j+1} \underbrace{\left(-2 + \theta(A - Ay_i^j - \beta) - \frac{\theta}{\tau} \right)}_{B_i} + \underbrace{1}_{C_i} y_{i+1}^{j+1} = \underbrace{\theta \phi_i^j}_{D_i},$$

$$\theta\phi_i^j = y_i^j \left(-\frac{\theta}{\tau} - \theta\beta \right) + \frac{\sigma - 1}{\sigma} \left(y_{i-1}^j - 2y_i^j + y_{i+1}^j \right).$$

Окончательно запишем схему (2.2.1) в виде

$$\begin{aligned} A_i y_{i-1}^{j+1} + B_i y_i^{j+1} + C_i y_{i+1}^{j+1} &= D_i, i = 1, \dots, N-1, \\ y_0^{j+1} &= u_1^{j+1}, y_N^{j+1} = u_2^{j+1}. \end{aligned} \quad (2.2.2)$$

В данном случае $A_i = 1, C_i = 1, B_i = -2 + \theta(A - Ay_i^j - \beta) - \frac{\theta}{\tau}$, а правая часть $D_i = y_i^j \theta \left(-\frac{1}{\tau} - \beta \right) + \frac{\sigma-1}{\sigma} (y_{i-1}^j - 2y_i^j + y_{i+1}^j)$. Расширенная матрица этой системы имеет вид

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & u_1^{j+1} \\ A_1 & B_1 & C_1 & 0 & \dots & 0 & D_1 \\ 0 & A_2 & B_2 & C_2 & \dots & 0 & D_2 \\ & & & & & B_{N-1} & C_{N-1} & D_{N-1} \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & u_2^{j+1} \end{pmatrix}.$$

Для поиска решения будем использовать рекуррентное соотношение (верхний индекс не указан) [52]

$$y_{i-1} = K_{i-1} y_i + L_{i-1}, \quad (2.2.3)$$

где K_{i-1} и L_{i-1} являются прогоночными коэффициентами.

Для $i = 1$ имеем $y_0 = K_0 y_1 + L_0$. Поскольку $y_0 = u_1$, то $K_0 = 0, L_0 = u_1^{j+1}$. Избавимся от неизвестной y_{i-1} в (2.2.2), для этого подставим туда прогоночное уравнение (2.2.3):

$$A_i (K_{i-1} y_i + L_{i-1}) + B_i y_i + C_i y_{i+1} = D_i, i = 1, \dots, N-1. \quad (2.2.4)$$

Проведем преобразования (2.2.4) и явно выразим y_i , получим

$$y_i = \frac{-C_i}{A_i * K_{i-1} + B_i} y_{i+1} + \frac{D_i - A_i L_{i-1}}{A_i * K_{i-1} + B_i}. \quad (2.2.5)$$

Сравнивая (2.2.3) и (2.2.5), можем записать прогоночные коэффициенты

$$K_i = \frac{-C_i}{A_i * K_{i-1} + B_i}; L_i = \frac{D_i - A_i L_{i-1}}{A_i * K_{i-1} + B_i}. \quad (2.2.6)$$

Пользуясь начальными значениями K_0, L_0 последовательно вычислим коэффициенты $K_i, L_i, i = 1, 2, \dots, N - 1$ по формулам (2.2.6). Данный этап называется прямой прогонкой.

Из прогоночного соотношения при $i = N$

$$y_{N-1} = K_{N-1}y_N + L_{N-1},$$

для которого $y_N = u_2$, найдем y_{N-1} , а затем по формуле (2.2.3) последовательно найдем $y_{N-2}, y_{N-3}, \dots, y_1$. Данный этап называется обратной прогонкой.

2.3. Априорная оценка

Используя технику принципа максимума [43], найдем априорную оценку разностного решения.

Далее будем обозначать через P узлы сетки. На внутренних узлах сетки $\bar{\omega}_h$ рассмотрим уравнение относительно неизвестной сеточной функции $y(Q)$:

$$\sum_{Q \in S(P)} C_h(P, Q)y(Q) = F(P), P \in \omega_h, \quad (2.3.1)$$

где $C_h(P, Q), F(P)$ — заданные сеточные функции. Узел с максимальным по модулю коэффициентом C_h будем считать центральным. Запишем разностную схему (2.3.1) в канонической форме, разрешенной относительно центрального узла:

$$C(P)y(P) = \sum_{Q \in S'(P)} B(P, Q)y(Q) + F(P), P \in \omega_h. \quad (2.3.2)$$

Шаблон $S(P) = S'(P) + P$, где $S'(P)$ — совокупность узлов $S(P)$, не совпадающих с P . Знак «+» интерпретируется как знак объединения множеств.

Для уравнения (2.3.2) в граничных узлах зададим условие Дирихле:

$$y(P) = u(P), P \in \gamma_h.$$

Будем везде полагать, что сетка ω_h связна. В общем случае это означает, что для любых заданных точек $P_1 \in \omega_h, P_2 \in \omega_h$ существует система окрестностей $\{S'(P)\}, P \in \omega_h$, такая, что переход от P_1 к P_2 можно осуществить, используя узлы этих окрестностей.

В дальнейшем будем предполагать, что коэффициенты уравнения (2.3.2) удовлетворяют условиям неотрицательности:

$$C(P) > 0, B(P, Q) > 0, D(P) = C(P) - \sum_{Q \in S'(P)} B(P, Q) \geq 0 \quad (2.3.3)$$

для любого внутреннего узла $P \in \omega_h$ и любой точки Q из окрестности $S'(P)$ узла P .

Приведем ряд теорем, доказанных в [42], [43].

Пусть

$$L_h y = C(P)y(P) - \sum_{Q \in S'(P)} B(P, Q)y(Q) = F(P), P \in \omega_h.$$

Теорема 2.3.1. (принцип максимума) Пусть $y(P)$ — некоторая сеточная функция, заданная на ω_h и не равная постоянной ($y(P) \not\equiv const$). Тогда, если $L_h y \leq 0$ ($L_h y \geq 0$), то $y(P)$ не может принимать наибольшего положительного (наименьшего отрицательного) значения во внутренних узлах $P \in \omega_h$.

Теорема 2.3.2. Пусть функция $y(P)$, определенная на $\bar{\omega}_h$, неотрицательна на границе γ_h и выполнено условие

$$L_h y \geq 0, P \in \omega_h.$$

Тогда $y(P)$ неотрицательна для всех $P \in \bar{\omega}_h$:

$$y(P) \geq 0, P \in \bar{\omega}_h.$$

Если же $y(P) \leq 0$ на γ_h , $L_h y \leq 0$ на ω_h , то

$$y(P) \leq 0, P \in \bar{\omega}_h.$$

Следствие 2.3.1. Пусть выполнены условия (2.3.3) и $D(P) \neq 0$. Тогда однородное уравнение $L_h y = 0$ имеет единственное решение $y(P) \equiv 0, P \in \bar{\omega}_h$, а уравнение $L_h y = F$ однозначно разрешимо при любых правых частях F .

Теорема 2.3.3. (теорема сравнения) Пусть $y(P)$ и $\tilde{y}(P)$ — решения задач

$$L_h y = F(P), L_h \tilde{y} = \tilde{F}(P),$$

где $\tilde{F}(P) \geq 0$.

Тогда, если $|F| \leq \tilde{F}$ на ω_h , $|u| \leq |\tilde{u}|$ на γ_h , то $|y(P)| \leq \tilde{y}(P)$ на $\bar{\omega}_h$.

Следствие 2.3.2. Для решения однородного уравнения

$$L_h y = 0, P \in \omega_h,$$

$$y(P) = 0, P \in \gamma_h,$$

справедлива оценка

$$\|y\|_{\bar{\omega}_h} \leq \|y\|_{\gamma},$$

где $\|y\|_{\bar{\omega}_h} = \max_{P \in \bar{\omega}_h} |y(P)|$, $\|y\|_{\gamma} = \max_{P \in \gamma_h} |y(P)|$.

Теорема 2.3.4. Пусть коэффициенты уравнения (2.3.2) удовлетворяют условиям:

$$C(P) > 0, B(P, Q) > 0, D(P) > 0, P \in \omega_h,$$

тогда для решения задачи (2.3.2) с нулевым граничным условием $u(P) = 0$ справедлива оценка

$$\|y\|_C \leq \left\| \frac{F(P)}{D(P)} \right\|_C,$$

где $\|y\|_C = \max_{P \in \omega_h} |y(P)|$.

Таким образом, условия положительности коэффициентов

$$C(P) > 0, B(P, Q) > 0, D(P) > 0 \text{ для всех } P \in \omega_h, Q \in S'(P) \quad (2.3.4)$$

гарантируют однозначную разрешимость, монотонность и устойчивость в равномерной норме по отношению к малому возмущению входных данных.

Запишем разностное уравнение (2.2.1) в следующем виде:

$$\begin{aligned} & \left(\frac{2\sigma\tau}{h^2} - A\tau(1 - y_i^j) + \beta\tau + 1 \right) y_i^{j+1} = \frac{\sigma\tau}{h^2} \left(y_{i-1}^{j+1} + y_{i+1}^{j+1} \right) + \\ & + \frac{(1 - \sigma)\tau}{h^2} \left(y_{i-1}^j + y_{i+1}^j \right) + y_i^j \left(1 + \beta\tau - 2\frac{(1 - \sigma)\tau}{h^2} \right), 0 < i < N, j \geq 0. \end{aligned}$$

Пусть $P = P(x_i, t_{j+1})$ — центральный узел и шаблон $S'(P)$ состоит из узлов: $Q_1(x_i, t_j)$, $Q_2(x_{i-1}, t_{j+1})$, $Q_3(x_{i+1}, t_{j+1})$, $Q_4(x_{i-1}, t_j)$, $Q_5(x_{i+1}, t_j)$. Тогда ко-

ээффициенты канонической формы имеют вид:

$$\begin{aligned} C(P) &= \frac{2\sigma\tau}{h^2} - A\tau(1 - y_i^j) + \beta\tau + 1, \\ B(P, Q_2) &= B(P, Q_3) = \frac{\sigma\tau}{h^2}, \\ B(P, Q_4) &= B(P, Q_5) = \frac{(1 - \sigma)\tau}{h^2}, \\ B(P, Q_1) &= 1 + \beta\tau - 2\frac{(1 - \sigma)\tau}{h^2}. \end{aligned}$$

Определим условия, при которых схема принадлежит рассматриваемому классу. Рассмотрим коэффициент $C(P)$. В соответствии с общими условиями наложим следующие требования:

$$\frac{2\sigma\tau}{h^2} - A\tau(1 - y_i^j) + \beta\tau + 1 > 0,$$

или, что то же самое,

$$2\sigma\tau > h^2 \left[A\tau(1 - y_i^j) - \beta\tau - 1 \right].$$

Покажем, что

$$A\tau(1 - y_i^j) - \beta\tau - 1 < 0. \quad (2.3.5)$$

Если $y_i^j > 1$, то ввиду неотрицательности параметров A, β и шага τ , все выражение отрицательно.

Для случая $0 \leq y_i^j \leq 1$ заменим функцию y_i^j ее минимально возможным значением, чтобы максимизировать $A\tau(1 - y_i^j)$. Тогда при

$$\tau < \frac{1}{A - \beta} \quad (2.3.6)$$

неравенство (2.3.5) истинно.

Нетрудно видеть, что для $0 < \sigma < 1$, коэффициенты $B(P, Q_2), B(P, Q_3), B(P, Q_4), B(P, Q_5)$ положительны.

Пусть $B(P, Q_1) > 0$:

$$1 + \beta\tau - 2\frac{(1 - \sigma)\tau}{h^2} > 0,$$

т.е.

$$\tau \left(\beta - 2 \frac{(1-\sigma)}{h^2} \right) > -1.$$

Если

$$\beta > \frac{2(1-\sigma)}{h^2}$$

то шаг τ может принимать любое допустимое значение. Однако учитывая малость шага h , заключаем, что это условие не имеет смысла. Если же

$$\frac{A}{2} < \beta < \min \left\{ A, \frac{2(1-\sigma)}{h^2} \right\}, \quad (2.3.7)$$

то в этом случае

$$\tau < \frac{1}{2 \frac{(1-\sigma)}{h^2} - \beta}. \quad (2.3.8)$$

В рассматриваемой задаче при выполнении условий (2.3.7)-(2.3.8) имеет место неравенство

$$F(P) = \frac{(1-\sigma)\tau}{h^2} (y_{i-1}^j + y_{i+1}^j) + y_i^j \left(1 + \beta\tau - 2 \frac{(1-\sigma)\tau}{h^2} \right) > 0.$$

Тогда коэффициент $D(P)$ будет вычисляться по формуле

$$D(P) = \frac{2\sigma\tau}{h^2} - A\tau(1 - y_i^j) + \beta\tau + 1 - \frac{2\sigma\tau}{h^2} = -A\tau(1 - y_i^j) + \beta\tau + 1 > 0.$$

Выше доказано, что выражение $A\tau(1 - y_i^j) - \beta\tau - 1$ отрицательно при выполнении условия (2.3.6). Отсюда следует положительность коэффициента $D(P)$ при выполнении того же условия.

Пусть

$$m_1 = \min_{(x,t) \in \bar{D}} \{u_1(t), u_2(t), u_0(x)\}, m_2 = \max_{(x,t) \in \bar{D}} \{u_1(t), u_2(t), u_0(x)\}.$$

Теорема 2.3.5. Пусть выполнены условия

$$\frac{A}{2} < \beta < \min \left\{ A, \frac{2(1-\sigma)}{h^2} \right\}, \quad (2.3.9)$$

$$\tau < \min \left\{ \frac{1}{2 \frac{(1-\sigma)}{h^2} - \beta}, \frac{1}{A - \beta} \right\} \quad (2.3.10)$$

и разностное решение $y(x, t)$ неотрицательно на сетке $\overline{\omega}_{h\tau}$. Тогда справедлива двусторонняя оценка:

$$0 \leq y_i^j \leq e^{At_j} m_2, i = \overline{0, N}, j = \overline{0, M}.$$

Доказательство. Будем следовать методике доказательства, изложенной в работе [31]. На нулевом слое справедлива следующая оценка

$$0 \leq m_1 \leq y_i^0 = u_0(x_i) \leq m_2. \quad (2.3.11)$$

По индукции предположим, что оценка (2.3.11) верна также и для всех $l = \overline{1, j}$. Неравенство справедливо и для $l = j + 1$.

Максимум и минимум сеточной функции может достигаться либо на границе, либо во внутренней точке сетки. В соответствии с двусторонней оценкой, полученной П.П. Матусом в [86], имеет место неравенство:

$$m_1^{j+1} \leq y_i^{j+1} \leq m_2^{j+1}, \quad (2.3.12)$$

где

$$m_1 = \min \left\{ \min\{u_1^{j+1}, u_2^{j+1}\}, \min \left\{ \frac{F_i^j}{D_i^j} \right\} \right\} \geq 0,$$

$$m_2 = \max \left\{ \max\{u_1^{j+1}, u_2^{j+1}\}, \max \left\{ \frac{F_i^j}{D_i^j} \right\} \right\} \geq 0.$$

Тогда

$$\begin{aligned} \max_i \frac{F(P)}{D(P)} &\leq \frac{\max_i y_i^j \left[\frac{(1-\sigma)\tau}{h^2} + 1 + \beta\tau - 2\frac{(1-\sigma)\tau}{h^2} + \frac{(1-\sigma)\tau}{h^2} \right]}{-A\tau(1 - \min_i y_i^j) + \beta\tau + 1} = \\ &= \frac{\max_i y_i^j [1 + \beta\tau]}{1 + \beta\tau - A\tau} \leq \max_i y_i^j e^{A\tau}. \end{aligned} \quad (2.3.13)$$

С учетом (2.3.13):

$$y_i^{j+1} \leq \max\{m_2^{j+1}, e^{A\tau} \max_i y_i^j\} \leq m_2 e^{At_{j+1}}.$$

Что и требовалось доказать. □

Назовем β и τ допустимыми, если они удовлетворяют ограничениям (2.3.9), (2.3.10) соответственно. Отметим, что множество допустимых значений β и τ не пусто, если принять во внимание произвольность σ .

Будем рассматривать равномерную сеточную норму

$$\|y\|_C = \max_{x \in \omega_h} |y^j(x)|, \|y\|_{\bar{C}} = \max_{x \in \bar{\omega}_h} |y^j(x)| = \|y^j\|_{L^\infty}.$$

Следствие 2.3.3. Для решения разностной схемы (2.2.1), (2.1.5), (2.1.6) справедлива априорная оценка

$$\|y^j\|_{\bar{C}} \leq e^{At_j} m_2, j = \overline{0, N}.$$

2.4. Исследование монотонности и устойчивости в дискретной модели

Определение 2.4.1. Пусть разностная схема (дискретная модель)

$$L_h y = \phi \tag{2.4.1}$$

аппроксимирует дифференциальную задачу (непрерывную модель)

$$Ly = f$$

и \tilde{y} — решение разностной задачи (2.4.1) с возмущенными входными данными \tilde{f} (включая начальные и краевые условия):

$$L_h \tilde{y} = \tilde{\phi}, \tilde{\phi} \geq 0. \tag{2.4.2}$$

Тогда разностная схема (2.4.1) называется монотонной, если из условий

$$\tilde{\phi} \geq \phi (\tilde{\phi} \leq \phi)$$

следует

$$\tilde{y} \geq y (\tilde{y} \leq y).$$

Будем рассматривать сеточную функцию $\delta y = \tilde{y} - y$, где y — решение разностной схемы (2.2.1),(2.1.5),(2.1.6), а \tilde{y} — решение разностной схемы для задачи с возмущенными входными данными:

$$\frac{\tilde{y}_i^{j+1} - \tilde{y}_i^j}{\tau} = \sigma \frac{\tilde{y}_{i-1}^{j+1} - 2\tilde{y}_i^{j+1} + \tilde{y}_{i+1}^{j+1}}{h^2} + (1 - \sigma) \frac{\tilde{y}_{i-1}^j - 2\tilde{y}_i^j + \tilde{y}_{i+1}^j}{h^2} + (A - \beta)\tilde{y}_i^{j+1} + \beta\tilde{y}_i^j - A\tilde{y}_i^j\tilde{y}_i^{j+1}. \quad (2.4.3)$$

$$\tilde{y}_0^j = \tilde{u}_1^j, \tilde{y}_N^j = \tilde{u}_2^j, \quad (2.4.4)$$

$$\tilde{y}_i^0 = \tilde{y}(x_i, 0) = \tilde{u}_0(x_i). \quad (2.4.5)$$

Тогда поэлементно вычитая из (2.4.3)-(2.4.5) уравнения (2.2.1),(2.1.5),(2.1.6), получим задачу для сеточной функции $\delta y = \tilde{y} - y$:

$$\frac{\delta y_i^{j+1} - \delta y_i^j}{\tau} = \frac{\sigma}{h^2} \left(\delta y_{i-1}^{j+1} - 2\delta y_i^{j+1} + \delta y_{i+1}^{j+1} \right) + \frac{(1 - \sigma)}{h^2} \left(\delta y_{i-1}^j - 2\delta y_i^j + \delta y_{i+1}^j \right) + \delta y_i^j \beta + \delta y_i^{j+1} (A - \beta) - A\tilde{y}_i^j \tilde{y}_i^{j+1} + A y_i^j y_i^{j+1},$$

$$\delta y_0^j = \tilde{u}_1^j - u_1^j, \delta y_N^j = \tilde{u}_2^j - u_2^j,$$

$$\delta y_i^0 = \tilde{u}_0 - u_0.$$

Рассмотрим выражение

$$\begin{aligned} -A\tilde{y}_i^j \tilde{y}_i^{j+1} + A y_i^j y_i^{j+1} &= -A\tilde{y}_i^j \tilde{y}_i^{j+1} + (A\tilde{y}_i^j y_i^{j+1} - A\tilde{y}_i^j y_i^{j+1}) + A y_i^j y_i^{j+1} = \\ &= -A\tilde{y}_i^j \left(\tilde{y}_i^{j+1} - y_i^{j+1} \right) - A y_i^{j+1} \left(\tilde{y}_i^j - y_i^j \right) = -A\tilde{y}_i^j \delta y_i^{j+1} - A y_i^{j+1} \delta y_i^j. \end{aligned}$$

Тогда запишем задачу для функции δy :

$$\frac{\delta y_i^{j+1} - \delta y_i^j}{\tau} = \frac{\sigma}{h^2} \left(\delta y_{i-1}^{j+1} - 2\delta y_i^{j+1} + \delta y_{i+1}^{j+1} \right) + \frac{(1 - \sigma)}{h^2} \left(\delta y_{i-1}^j - 2\delta y_i^j + \delta y_{i+1}^j \right) + \delta y_i^j \beta + \delta y_i^{j+1} (A - \beta) - A\tilde{y}_i^j \delta y_i^{j+1} - A y_i^{j+1} \delta y_i^j.$$

После группировки в последнем равенстве слагаемых по слоям сетки имеем

$$\begin{aligned} \frac{\sigma\tau}{h^2} \left(\delta y_{i-1}^{j+1} - 2\delta y_i^{j+1} + \delta y_{i+1}^{j+1} \right) + \tau \delta y_i^{j+1} (A - \beta) - \tau A\tilde{y}_i^j \delta y_i^{j+1} - \delta y_i^{j+1} &= \\ = -\delta y_i^j + \frac{\tau(\sigma - 1)}{h^2} \left(\delta y_{i-1}^j - 2\delta y_i^j + \delta y_{i+1}^j \right) - \tau \delta y_i^j \beta + \tau A y_i^{j+1} \delta y_i^j. \end{aligned}$$

Приходим к каноническому виду разностной схемы:

$$\begin{aligned} \delta y_i^{j+1} \left(\frac{2\sigma\tau}{h^2} - A\tau \left(1 - \tilde{y}_i^j \right) + \beta\tau + 1 \right) &= \frac{\sigma\tau}{h^2} \left(\delta y_{i-1}^{j+1} + \delta y_{i+1}^{j+1} \right) + \\ + \left[\delta y_i^j \left(1 + \tau\beta - \tau A y_i^{j+1} - \frac{2\tau(1-\sigma)}{h^2} \right) + \frac{\tau(1-\sigma)}{h^2} \left(\delta y_{i-1}^j + \delta y_{i+1}^j \right) \right]. \end{aligned} \quad (2.4.6)$$

Здесь коэффициенты $B(P, Q_i), i = \overline{2, 5}$ для значения параметра $0 < \sigma < 1$ положительны:

$$\begin{aligned} B(P, Q_2) = B(P, Q_3) &= \frac{\sigma\tau}{h^2} > 0, \\ B(P, Q_4) = B(P, Q_5) &= \frac{(1-\sigma)\tau}{h^2} > 0. \end{aligned}$$

Коэффициенты $C(P)$ и $D(P)$ имеют вид

$$\begin{aligned} C(P) &= \frac{2\sigma\tau}{h^2} - A\tau \left(1 - \tilde{y}_i^j \right) + \beta\tau + 1, \\ D(P) &= -A\tau \left(1 - \tilde{y}_i^j \right) + \beta\tau + 1. \end{aligned}$$

Выше была доказана положительность этих коэффициентов, содержащих в формуле y_i^j . Применяя аналогичные рассуждения и для \tilde{y}_i^j , получаем $C(P) > 0$, $D(P) > 0$.

Определим условия, при которых множители в выражении

$$F(P) = \delta y_i^j \left(1 + \tau\beta - \tau A y_i^{j+1} - \frac{2\tau(1-\sigma)}{h^2} \right) + \frac{\tau(1-\sigma)}{h^2} \left(\delta y_{i-1}^j + \delta y_{i+1}^j \right)$$

положительны. Рассмотрим множитель, входящий в первое слагаемое последней формулы:

$$1 + \tau\beta - \tau A y_i^{j+1} - \frac{2\tau(1-\sigma)}{h^2} = 1 + \tau \left[\beta - A y_i^{j+1} - \frac{2(1-\sigma)}{h^2} \right].$$

Вариант $\beta > A m_2 e^{AT} + 2(1-\sigma)/h^2$, при котором шаг τ может принимать любое допустимое значение, не имеет смысла, поскольку весовой коэффициент должен удовлетворять условию $A/2 < \beta < A$.

Для случая $\beta < Am_2e^{AT} + \frac{2(1-\sigma)}{h^2}$ считаем, что $\beta < A$ и

$$\tau < \frac{1}{Am_2e^{AT} + 2\frac{(1-\sigma)}{h^2} - \beta}.$$

Применим двустороннюю оценку (2.3.12) к функции δy_i^j :

$$\delta m_1^{j+1} \leq \delta y_i^{j+1} \leq \delta m_2^{j+1},$$

где

$$m_1 = \min \left\{ \min\{\delta u_1^{j+1}, \delta u_2^{j+1}\}, \min \left\{ \frac{F_i^j}{D_i^j} \right\} \right\} \geq 0,$$

$$m_2 = \max \left\{ \max\{\delta u_1^{j+1}, \delta u_2^{j+1}\}, \max \left\{ \frac{F_i^j}{D_i^j} \right\} \right\} \geq 0.$$

Рассмотрим отношение

$$\frac{F(P)}{D(P)} = \frac{\tau \frac{(1-\sigma)}{h^2} \delta y_{i-1}^j + \delta y_i^j \left(1 + \tau\beta - \tau A y_i^{j+1} - \tau \frac{2(1-\sigma)}{h^2} \right) + \tau \frac{(1-\sigma)}{h^2} \delta y_{i+1}^j}{-A\tau \left(1 - \tilde{y}_i^j \right) + \beta\tau + 1}. \quad (2.4.7)$$

Если $0 < \sigma < 1$ и выполнены неравенства

$$\frac{A}{2} < \beta < \min \left\{ A, \frac{2(1-\sigma)}{h^2} \right\},$$

$$\tau < \min \left\{ \frac{1}{A - \beta}, \frac{1}{Am_2e^{AT} + 2\frac{(1-\sigma)}{h^2} - \beta} \right\} \quad (2.4.8)$$

и для всех $(x, t) \in \bar{\omega}_{h\tau}$ справедливо

$$\tilde{u}_1^j - u_1^j \geq 0, \tilde{u}_2^j - u_2^j \geq 0,$$

$$\tilde{u}_0(x_i) - u_0(x_i) \geq 0,$$

то из отношения (2.4.7) следует

$$\delta y = \tilde{y} - y \geq 0.$$

Следовательно в соответствии с определением 2.4.1 разностная схема

(2.2.1),(2.1.5),(2.1.6) является монотонной.

Исследуем устойчивость разностной схемы. Сеточная функция δy_i^j может достигать своего максимума либо на границе $\|\delta y^{j+1}\|_{\bar{C}} = \max\{|\delta u_1(t)|, |\delta u_2(t)|\}$, либо во внутренней точке. Тогда для случая достижения максимума во внутренней точке из уравнения (2.4.6) следует неравенство:

$$\|\delta y^{j+1}\|_C \leq \left\| \frac{F}{D} \right\|_C \leq e^{\tau\lambda} \|\delta y^j\|_C, \lambda = \text{const} > 0.$$

Объединим оценки:

$$\|\delta y^{j+1}\|_C \leq \max \left\{ \max_t \{|\delta u_1(t)|, |\delta u_2(t)|\}, e^{\lambda t_{j+1}} \|\delta u_0(x)\|_C \right\}. \quad (2.4.9)$$

Неравенство (2.4.9) демонстрирует устойчивость разностной схемы (2.2.1),(2.1.5),(2.1.6) при выполнении условия (2.4.8) по отношению к малому возмущению входных данных.

Замечание. Доказано достаточное условие устойчивости. Неизвестно является ли оно необходимым условием. Численный эксперимент показывает, что устойчивость имеет место и при нарушении этих условий.

2.5. Выводы

1. Разработан и обоснован эффективный линейный вычислительный метод для непрерывной нелинейной модели роста–распространения.

2. Предложенная разностная схема, имеющая порядок аппроксимации $O(h^2 + \tau)$, позволила свести задачу поиска решения нелинейного уравнения к решению системы линейных алгебраических уравнений методом прогонки.

3. Получена двусторонняя оценка разностного решения, доказана монотонность и устойчивость предложенного метода в сеточном аналоге C –нормы.

4. Аппроксимация и устойчивость означают сходимость приближенного решения к точному.

Глава 3.

Сингулярная модель роста–распространения и базовые инструменты ее дискретизации

3.1. Основной инструментарий исследования од- номерной стационарной сингулярной модели распределения субстанции

3.1.1. Формула Тейлора с оператором Бесселя

Рассмотрим отрезок $[0, 1]$ вещественной прямой. Весовые пространства $H_\gamma^m(0, 1)$ (пространства И.А. Киприянова) установим как замыкание класса $C_{\text{чет}}^\infty([0, 1]) \subset C^\infty([0, 1])$, которое состоит из четных функций по норме

$$\|f\|_{m,\gamma} = \left(\sum_{\substack{0 \leq i_1 + 2i_2 \leq m \\ i_1=0,1}} \int_0^1 x^\gamma |D_x^{i_1} B_x^{i_2} f(x)|^2 dx \right)^{\frac{1}{2}},$$

где $D_x = \frac{d}{dx}$, $B_x = \frac{d^2}{dx^2} + \frac{\gamma}{x} \frac{d}{dx}$ — оператор Бесселя.

Теорема 3.1.1. Пусть функция $f(x)$ непрерывно дифференцируема в окрестности точки $\xi \in (0, 1)$, а ее вторая производная кусочно-непрерывна в этой окрестности. Тогда справедлива формула

$$f(x) = f(\xi) + \frac{\xi^\gamma (x^{1-\gamma} - \xi^{1-\gamma})}{1-\gamma} f'(\xi) + \frac{1}{1-\gamma} \int_{\xi}^x s^\gamma (x^{1-\gamma} - s^{1-\gamma}) B_s f(s) ds. \quad (3.1.1)$$

Доказательство. Для доказательства формулы (3.1.1) рассмотрим интеграл

$$I = \int_{\xi}^x s^\gamma (x^{1-\gamma} - s^{1-\gamma}) B_s f(s) ds.$$

Покажем, что

$$B_s f = s^{-\gamma} D_s (s^\gamma D_s f(s)). \quad (3.1.2)$$

В самом деле,

$$s^{-\gamma} D_s (s^\gamma D_s f(s)) = s^{-\gamma} (\gamma s^{\gamma-1} D_s f(s) + s^\gamma D_s^2 f(s)) = D_s^2 f(s) + \frac{\gamma}{s} D_s f(s).$$

Представление (3.1.2) называется самоспоряженной формой оператора Бесселя. Тогда

$$\begin{aligned} I &= \int_{\xi}^x (x^{1-\gamma} - s^{1-\gamma}) D_s (s^\gamma D_s f(s)) ds = x^{1-\gamma} \int_{\xi}^x D_s (s^\gamma D_s f(s)) ds - \\ &\quad - \int_{\xi}^x s^{1-\gamma} D_s (s^\gamma D_s f(s)) ds = x^{1-\gamma} s^\gamma D_s f(s) \Big|_{\xi}^x - s D_s f(s) \Big|_{\xi}^x + \\ &\quad + \int_{\xi}^x D_s (s^{1-\gamma}) s^\gamma D_s f(s) ds = \xi f'(\xi) - x^{1-\gamma} \xi^\gamma f'(\xi) + (1-\gamma) f(x) - (1-\gamma) f(\xi). \end{aligned}$$

Следовательно,

$$f(x) = f(\xi) + \frac{\xi^\gamma (x^{1-\gamma} - \xi^{1-\gamma})}{1-\gamma} f'(\xi) + \frac{1}{1-\gamma} \int_{\xi}^x s^\gamma (x^{1-\gamma} - s^{1-\gamma}) B_s f(s) ds.$$

□

Если $\gamma = 0$, то формула (3.1.1) совпадает с формулой Тейлора с остаточным членом в интегральной форме. Поэтому ее называют [13] формулой Тейлора с оператором Бесселя.

В дальнейшем будем считать, что $\gamma > 0$.

В [14] доказана формула Грина с оператором Бесселя, которая имеет вид:

$$f(x) = \sum_{0 \leq 2i \leq m-1} \tilde{\phi}_{2i,\gamma}(x, x_0) B^i f(x_0) + \int_0^1 t^\gamma \phi_{m,\gamma}(x, t, x_0) D^{m_1} B^{m_2} f(t) dt,$$

где $m_1 + 2m_2 = m, m_1 = 0, 1, m_2$ — целое неотрицательное,

$$\phi_{1,\gamma}(x, t, x_0) = \begin{cases} t^{-\gamma}, & x_0 \leq t < x, \\ -t^{-\gamma}, & x < t < x_0, \\ 0, & \text{иначе,} \end{cases}$$

$$\phi_{2m+1,\gamma}(x, t, x_0) = \int_{x_0}^x s^{-\gamma} \int_0^s y^\gamma \phi_{2m-1,\gamma}(y, t, x_0) dy ds,$$

$$\phi_{2m,\gamma}(x, t, x_0) = \int_t^\infty \phi_{2m-1,\gamma}(x, \tau, x_0) d\tau,$$

$$\tilde{\phi}_{0,\gamma}(x, x_0) = 1,$$

$$\tilde{\phi}_{2i,\gamma} = \int_{x_0}^x x_{2i}^{-\gamma} \int_0^{x_{2i}} x_{2i-1}^\gamma \cdots \int_{x_0}^{x_3} x_2^{-\gamma} \int_0^{x_2} x_1^\gamma dx_1 \cdots dx_{2i}.$$

В частности для $m = 2$, получим

$$f(x) = f(\xi) + \frac{x^{1-\gamma} - \xi^{1-\gamma}}{1-\gamma} \int_0^\xi t^\gamma B f(t) dt + \int_\xi^x t^\gamma \frac{x^{1-\gamma} - t^{1-\gamma}}{1-\gamma} B f(t) dt, \xi < x,$$

$$f(x) = f(\xi) + \frac{x^{1-\gamma} - \xi^{1-\gamma}}{1-\gamma} \int_0^x t^\gamma B f(t) dt + \int_x^\xi t^\gamma \frac{t^{1-\gamma} - \xi^{1-\gamma}}{1-\gamma} B f(t) dt, \xi > x.$$

3.1.2. Интерполяция на отрезке $[0, 1]$

Пусть $f \in H_\gamma^2(0, 1)$. Рассмотрим разность $f(1) - f(\xi)$, $\xi \in [0, 1]$. Запишем разложение $f(1)$ по формуле Грина при $x = 1$:

$$f(1) = f(\xi) + \frac{1^{1-\gamma} - \xi^{1-\gamma}}{1-\gamma} \int_0^\xi t^\gamma Bf(t) dt + \int_\xi^1 t^\gamma \frac{1^{1-\gamma} - t^{1-\gamma}}{1-\gamma} Bf(t) dt,$$

$$f(1) - f(\xi) = \frac{1^{1-\gamma} - \xi^{1-\gamma}}{1-\gamma} \int_0^\xi t^\gamma Bf(t) dt + \int_\xi^1 t^\gamma \frac{1^{1-\gamma} - t^{1-\gamma}}{1-\gamma} Bf(t) dt. \quad (3.1.3)$$

$$\int_0^1 |f(1) - f(\xi)|^2 \xi^\gamma d\xi = \int_0^1 \xi^\gamma \left(\frac{1 - \xi^{1-\gamma}}{1-\gamma} \int_0^\xi t^\gamma Bf(t) dt + \int_\xi^1 t^\gamma \frac{1 - t^{1-\gamma}}{1-\gamma} Bf(t) dt \right)^2 d\xi.$$

Применим неравенство $(a+b)^2 \leq 2(a^2+b^2)$, а затем воспользуемся неравенством Коши-Буняковского. Получим

$$\begin{aligned} \int_0^1 |f(1) - f(\xi)|^2 \xi^\gamma d\xi &\leq 2 \int_0^1 \xi^\gamma \left[\left(\frac{1 - \xi^{1-\gamma}}{1-\gamma} \right)^2 \left(\int_0^\xi t^\gamma Bf(t) dt \right)^2 + \right. \\ &\quad \left. + \left(\int_\xi^1 t^\gamma \frac{1 - t^{1-\gamma}}{1-\gamma} Bf(t) dt \right)^2 \right] d\xi \leq \\ &\leq \frac{2}{(1-\gamma)^2} \left[\int_0^1 \xi^\gamma (1 - \xi^{1-\gamma})^2 \int_0^\xi t^\gamma dt \int_0^\xi t^\gamma |Bf(t)|^2 dt d\xi + \right. \\ &\quad \left. + \int_0^1 \xi^\gamma \int_\xi^1 t^\gamma (1 - t^{1-\gamma})^2 dt \int_\xi^1 t^\gamma |Bf(t)|^2 dt d\xi \right]. \end{aligned}$$

Расширим пределы интегрирования

$$\begin{aligned} \int_0^1 |f(1) - f(\xi)|^2 \xi^\gamma d\xi &\leq \frac{2}{(1-\gamma)^2} \int_0^1 t^\gamma |Bf(t)|^2 dt \left[\int_0^1 \xi^\gamma (1 - \xi^{1-\gamma})^2 \times \right. \\ &\quad \left. \times \int_0^\xi t^\gamma dt d\xi + \int_0^1 \xi^\gamma \int_\xi^1 t^\gamma (1 - t^{1-\gamma})^2 dt d\xi \right]. \end{aligned}$$

Оценим интегралы, входящие в неравенство.

$$\frac{1}{\gamma+1} \int_0^1 \xi^\gamma (1 - \xi^{1-\gamma})^2 \xi^{\gamma+1} d\xi \leq \frac{2}{\gamma+1} \int_0^1 \xi^{2\gamma+1} d\xi + \frac{2}{\gamma+1} \int_0^1 \xi^3 d\xi \leq C_1(\gamma);$$

$$\begin{aligned} \int_\xi^1 t^\gamma (1 - t^{1-\gamma})^2 dt &\leq 2 \int_\xi^1 t^\gamma dt + 2 \int_\xi^1 t^{2-\gamma} dt = \frac{2}{\gamma+1} (1 - \xi^{\gamma+1}) + \\ &\quad + \frac{2}{3-\gamma} (1 - \xi^{3-\gamma}); \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \int_0^1 \xi^\gamma \int_\xi^1 t^\gamma (1 - t^{1-\gamma})^2 dt d\xi &\leq \frac{2}{\gamma+1} \int_0^1 \xi^\gamma (1 - \xi^{\gamma+1}) d\xi + \\ &\quad + \frac{2}{3-\gamma} \int_0^1 \xi^\gamma (1 - \xi^{3-\gamma}) d\xi \leq C_2(\gamma). \end{aligned}$$

Таким образом, можно записать оценку разности $f(1) - f(\xi)$:

$$\int_0^1 \xi^\gamma |f(1) - f(\xi)|^2 d\xi \leq \widetilde{C}_\gamma \int_0^1 t^\gamma |Bf(t)|^2 dt. \quad (3.1.4)$$

Дифференцируя (3.1.3) по ξ , получим:

$$\begin{aligned} D(f(1) - f(\xi)) &= -\xi^{-\gamma} \int_0^\xi t^\gamma Bf(t) dt + \frac{1^{1-\gamma} - \xi^{1-\gamma}}{1-\gamma} \xi^\gamma Bf(\xi) - \\ &\quad - \frac{1^{1-\gamma} - \xi^{1-\gamma}}{1-\gamma} \xi^\gamma Bf(\xi) = -\xi^{-\gamma} \int_0^\xi t^\gamma Bf(t) dt. \end{aligned}$$

Далее возведем полученное равенство в квадрат и проинтегрируем от 0 до 1 по ξ с весом ξ^γ :

$$\begin{aligned} \int_0^1 \xi^\gamma |D(f(1) - f(\xi))|^2 d\xi &= \int_0^1 \xi^{-\gamma} \left(\int_0^\xi t^\gamma Bf(t) \right)^2 dt d\xi \leq \\ &\leq \int_0^1 \xi^{-\gamma} \int_0^\xi t^\gamma dt \int_0^\xi t^\gamma |Bf(t)|^2 dt d\xi = \frac{1}{\gamma+1} \int_0^1 \xi \int_0^\xi t^\gamma |Bf(t)|^2 dt d\xi \leq \\ &\leq C_3(\gamma) \int_0^1 t^\gamma |Bf(t)|^2 dt. \end{aligned} \quad (3.1.5)$$

Пользуясь неравенствами (3.1.4)-(3.1.5), запишем новую оценку

$$\|f(1) - f(x)\|_{H_\gamma^1(0,1)}^2 \leq C_\gamma \|f\|_{H_\gamma^2(0,1)}^2. \quad (3.1.6)$$

Сделаем замену переменных $\tilde{x} = hx$, $u(\tilde{x}) = f(x)$. Если $x = 1$, то $u(h) = f(1)$ и

$$D_x^{n_1} B_x^{n_2} = h^n D_{\tilde{x}}^{n_1} B_{\tilde{x}}^{n_2},$$

где $n_1 = 0, 1$, $n_1 + 2n_2 \leq 2$.

Теорема 3.1.2. Пусть функция $u(x) \in H_\gamma^2(0, h)$, тогда справедлива оценка

$$\|u(x) - u(h)\|_{H_\gamma^1(0,h)} \leq C_\gamma h \|u\|_{H_\gamma^2(0,h)},$$

где C_γ не зависит от u, h .

3.1.3. Интерполяционные свойства пространства

$$H_\gamma^2(x_j, x_{j+1})$$

Рассмотрим интерполяцию функции $f \in H_\gamma^2(x_j, x_{j+1})$ элементарными функциями специального вида.

Пусть $x_j = jh$, $j = 1, \dots, n$, $x_n = 1$.

$$\psi_1(x) = \frac{x^{1-\gamma} - x_j^{1-\gamma}}{x_{j+1}^{1-\gamma} - x_j^{1-\gamma}}, \quad (3.1.7)$$

$$\psi_2(x) = \frac{x_{j+1}^{1-\gamma} - x^{1-\gamma}}{x_{j+1}^{1-\gamma} - x_j^{1-\gamma}}. \quad (3.1.8)$$

Очевидно, что

$$\begin{aligned} \psi_1(x_{j+1}) &= 1, \psi_1(x_j) = 0, \\ \psi_2(x_{j+1}) &= 0, \psi_2(x_j) = 1. \end{aligned} \quad (3.1.9)$$

Так как

$$\begin{aligned}\psi_1'(x) &= (1 - \gamma) \frac{x^{-\gamma}}{x_{j+1}^{1-\gamma} - x_j^{1-\gamma}} > 0, \forall x \in [x_j, x_{j+1}], \\ \psi_2'(x) &= -(1 - \gamma) \frac{x^{-\gamma}}{x_{j+1}^{1-\gamma} - x_j^{1-\gamma}} < 0, \forall x \in [x_j, x_{j+1}],\end{aligned}$$

то функции $\psi_1(x)$ и $\psi_2(x)$ монотонны. Учитывая монотонность и (3.1.9), имеем

$$|\psi_1(x)| \leq 1, |\psi_2(x)| \leq 1. \quad (3.1.10)$$

Пусть

$$\tilde{f}(x) = f(x_{j+1})\psi_1(x) + f(x_j)\psi_2(x). \quad (3.1.11)$$

С учетом (3.1.9)

$$\begin{aligned}\tilde{f}(x_j) &= f(x_j), \\ \tilde{f}(x_{j+1}) &= f(x_{j+1}).\end{aligned}$$

Определение 3.1.1. Функцию $\tilde{f}(x)$, определенную по формуле (3.1.11), назовем интерполянтom функции $f \in H_\gamma^2(x_j, x_{j+1})$.

Исследуем поведение разности $f - \tilde{f}$ при $h \rightarrow 0$.

Теорема 3.1.3. Пусть $f \in H_\gamma^2(x_j, x_{j+1})$, \tilde{f} — интерполянт функции f , тогда при достаточно маленьком h справедлива оценка

$$\|f - \tilde{f}\|_{H_\gamma^1(x_j, x_{j+1})} \leq ch \|f\|_{H_\gamma^2(x_j, x_{j+1})}, \quad (3.1.12)$$

где c не зависит от h, f и от j .

Доказательство. В формуле (3.1.11) разложим $f(x_{j+1})$ и $f(x_j)$ по формуле Тейлора в окрестности точки x . Тогда

$$\begin{aligned}
\tilde{f}(x) &= \left[f(x) + \frac{x^\gamma}{1-\gamma}(x_{j+1}^{1-\gamma} - x^{1-\gamma})Df(x) + \right. \\
&+ \left. \frac{1}{1-\gamma} \int_x^{x_{j+1}} s^\gamma(x_{j+1}^{1-\gamma} - s^{1-\gamma})Bf(s)ds \right] \frac{x^{1-\gamma} - x_j^{1-\gamma}}{x_{j+1}^{1-\gamma} - x_j^{1-\gamma}} + \\
&+ \left[f(x) + \frac{x^\gamma}{1-\gamma}(x_j^{1-\gamma} - x^{1-\gamma})Df(x) + \right. \\
&+ \left. \frac{1}{1-\gamma} \int_x^{x_j} s^\gamma(x_j^{1-\gamma} - s^{1-\gamma})Bf(s)ds \right] \frac{x_{j+1}^{1-\gamma} - x^{1-\gamma}}{x_{j+1}^{1-\gamma} - x_j^{1-\gamma}} = \\
&= f(x) + \frac{1}{1-\gamma} \int_x^{x_{j+1}} s^\gamma(x_{j+1}^{1-\gamma} - s^{1-\gamma})Bf(s)ds \frac{x^{1-\gamma} - x_j^{1-\gamma}}{x_{j+1}^{1-\gamma} - x_j^{1-\gamma}} + \\
&+ \frac{1}{1-\gamma} \int_x^x s^\gamma(s^{1-\gamma} - x_j^{1-\gamma})Bf(s)ds \frac{x_{j+1}^{1-\gamma} - x^{1-\gamma}}{x_{j+1}^{1-\gamma} - x_j^{1-\gamma}}.
\end{aligned}$$

Отсюда

$$\begin{aligned}
\tilde{f}(x) - f(x) &= \frac{1}{1-\gamma} \left[\int_x^{x_{j+1}} s^\gamma(x_{j+1}^{1-\gamma} - s^{1-\gamma})Bf(s)ds \frac{x^{1-\gamma} - x_j^{1-\gamma}}{x_{j+1}^{1-\gamma} - x_j^{1-\gamma}} + \right. \\
&+ \left. \int_x^x s^\gamma(s^{1-\gamma} - x_j^{1-\gamma})Bf(s)ds \frac{x_{j+1}^{1-\gamma} - x^{1-\gamma}}{x_{j+1}^{1-\gamma} - x_j^{1-\gamma}} \right]. \tag{3.1.13}
\end{aligned}$$

Кроме того,

$$\begin{aligned}
D(\tilde{f}(x) - f(x)) &= \frac{x^\gamma(x^{1-\gamma} - x_j^{1-\gamma})B_x f(x) \frac{x_{j+1}^{1-\gamma} - x^{1-\gamma}}{x_{j+1}^{1-\gamma} - x_j^{1-\gamma}} - \\
&- \int_{x_j}^x s^\gamma(s^{1-\gamma} - x_j^{1-\gamma})Bf(s)ds \frac{x^{-\gamma}}{x_{j+1}^{1-\gamma} - x_j^{1-\gamma}} - \\
&- \frac{x^\gamma(x_{j+1}^{1-\gamma} - x^{1-\gamma})B_x f(x) \frac{x^{1-\gamma} - x_j^{1-\gamma}}{x_{j+1}^{1-\gamma} - x_j^{1-\gamma}} + \\
&+ \int_x^{x_{j+1}} s^\gamma(x_{j+1}^{1-\gamma} - s^{1-\gamma})Bf(s)ds \frac{x^{-\gamma}}{x_{j+1}^{1-\gamma} - x_j^{1-\gamma}} =
\end{aligned}$$

$$= \frac{x^{-\gamma} \left[\int_x^{x_{j+1}} s^\gamma (x_{j+1}^{1-\gamma} - s^{1-\gamma}) Bf(s) ds - \int_{x_j}^x s^\gamma (s^{1-\gamma} - x_j^{1-\gamma}) Bf(s) ds \right]}{x_{j+1}^{1-\gamma} - x_j^{1-\gamma}}. \quad (3.1.14)$$

Далее каждое из равенств (3.1.13)-(3.1.14) возведем в квадрат и проинтегрируем на отрезке $[x_j, x_{j+1}]$ с весом x^γ . Из (3.1.13) получим:

$$I_1 = \int_{x_j}^{x_{j+1}} x^\gamma (\tilde{f}(x) - f(x))^2 dx = \frac{1}{(1-\gamma)^2} \int_{x_j}^{x_{j+1}} x^\gamma \left[\int_x^{x_{j+1}} s^\gamma (x_{j+1}^{1-\gamma} - s^{1-\gamma}) \times \right. \\ \left. \times Bf(s) ds \frac{x_{j+1}^{1-\gamma} - x_j^{1-\gamma}}{x_{j+1}^{1-\gamma} - x_j^{1-\gamma}} + \int_{x_j}^x s^\gamma (s^{1-\gamma} - x_j^{1-\gamma}) Bf(s) ds \frac{x_{j+1}^{1-\gamma} - x_j^{1-\gamma}}{x_{j+1}^{1-\gamma} - x_j^{1-\gamma}} \right]^2 dx.$$

Применим неравенство $(a_1 + \dots + a_n)^2 \leq n(a_1^2 + \dots + a_n^2)$, тогда

$$I_1 \leq \frac{2}{(1-\gamma)^2} \int_{x_j}^{x_{j+1}} x^\gamma \left[\left\{ \int_x^{x_{j+1}} s^\gamma (x_{j+1}^{1-\gamma} - s^{1-\gamma}) Bf(s) ds \frac{x_{j+1}^{1-\gamma} - x_j^{1-\gamma}}{x_{j+1}^{1-\gamma} - x_j^{1-\gamma}} \right\}^2 + \right. \\ \left. + \left\{ \int_{x_j}^x s^\gamma (s^{1-\gamma} - x_j^{1-\gamma}) Bf(s) ds \frac{x_{j+1}^{1-\gamma} - x_j^{1-\gamma}}{x_{j+1}^{1-\gamma} - x_j^{1-\gamma}} \right\}^2 \right] dx.$$

Учитывая (3.1.10):

$$I_1 \leq \frac{2}{(1-\gamma)^2} \int_{x_j}^{x_{j+1}} x^\gamma \left[\left\{ \int_x^{x_{j+1}} s^\gamma (x_{j+1}^{1-\gamma} - s^{1-\gamma}) Bf(s) ds \right\}^2 + \right. \\ \left. + \left\{ \int_{x_j}^x s^\gamma (s^{1-\gamma} - x_j^{1-\gamma}) Bf(s) ds \right\}^2 \right] dx.$$

Теперь применим неравенство Коши–Буняковского

$$I_1 \leq \frac{2}{(1-\gamma)^2} \int_{x_j}^{x_{j+1}} x^\gamma \left\{ \int_x^{x_{j+1}} s^\gamma |Bf(s)|^2 ds \int_x^{x_{j+1}} s^\gamma (x_{j+1}^{1-\gamma} - s^{1-\gamma})^2 ds + \right. \\ \left. + \int_{x_j}^x s^\gamma |Bf(s)|^2 ds \int_{x_j}^x s^\gamma (s^{1-\gamma} - x_j^{1-\gamma})^2 ds \right\} dx.$$

Поскольку

$$\frac{a^{1-\gamma} - b^{1-\gamma}}{1-\gamma} = \int_b^a t^{-\gamma} dt,$$

перепишем последнее неравенство

$$I_1 \leq 2 \int_{x_j}^{x_{j+1}} x^\gamma \left\{ \int_x^{x_{j+1}} s^\gamma |Bf(s)|^2 ds \int_x^{x_{j+1}} s^\gamma \left(\int_s^{x_{j+1}} t^{-\gamma} dt \right)^2 ds + \right. \\ \left. + \int_{x_j}^x s^\gamma |Bf(s)|^2 ds \int_{x_j}^x s^\gamma \left(\int_{x_j}^s t^{-\gamma} dt \right)^2 ds \right\} dx.$$

Расширим пределы интегрирования, учитывая пределы изменения подынтегральных функций в каждом из интегралов.

$$I_1 \leq 2 \int_{x_j}^{x_{j+1}} s^\gamma |Bf(s)|^2 ds \left\{ \int_{x_j}^{x_{j+1}} x_{j+1}^\gamma dx \int_{x_j}^{x_{j+1}} x_{j+1}^\gamma ds \left(\int_{x_j}^{x_{j+1}} x_j^{-\gamma} dt \right)^2 + \right. \\ \left. + \int_{x_j}^{x_{j+1}} x_{j+1}^\gamma dx \int_{x_j}^{x_{j+1}} x_{j+1}^\gamma ds \left(\int_{x_j}^{x_{j+1}} x_j^{-\gamma} dt \right)^2 \right\} = \\ = 4 \int_{x_j}^{x_{j+1}} s^\gamma |Bf(s)|^2 ds (x_{j+1} - x_j)^4 \frac{x_{j+1}^{2\gamma}}{x_j^{2\gamma}}.$$

Теперь, учитывая соотношения

$$x_{j+1} - x_j = h, \\ \frac{x_{j+1}}{x_j} = \frac{j+1}{j} \leq 2.$$

Получим

$$\int_{x_j}^{x_{j+1}} x^\gamma |\tilde{f}(x) - f(x)|^2 dx \leq 2^{2\gamma+2} h^4 \int_{x_j}^{x_{j+1}} s^\gamma |Bf(s)|^2 ds. \quad (3.1.15)$$

Возведем в квадрат и проинтегрируем на отрезке $[x_j, x_{j+1}]$ с весом x^γ равенство (3.1.14).

$$I_2 = \int_{x_j}^{x_{j+1}} x^\gamma |D(\tilde{f}(x) - f(x))|^2 dx = \\ = \frac{\int_{x_j}^{x_{j+1}} \left[\int_x^{x_{j+1}} s^\gamma (x_{j+1}^{1-\gamma} - s^{1-\gamma}) Bf(s) ds - \int_{x_j}^x s^\gamma (s^{1-\gamma} - x_j^{1-\gamma}) Bf(s) ds \right]^2 dx}{(x_{j+1}^{1-\gamma} - x_j^{1-\gamma})^2}.$$

Учитывая монотонность функций $\psi_1(x)$ и $\psi_2(x)$:

$$I_2 \leq \int_{x_j}^{x_{j+1}} \left[\int_x^{x_{j+1}} s^\gamma Bf(s) ds - \int_{x_j}^x s^\gamma Bf(s) ds \right]^2 dx.$$

Применим неравенство $(a_1 + \dots + a_n)^2 \leq n(a_1^2 + \dots + a_n^2)$ и неравенство Коши–Буняковского, и далее, расширяя пределы интегрирования, получим:

$$\begin{aligned} I_2 &\leq 4 \int_{x_j}^{x_{j+1}} s^\gamma |Bf(s)|^2 ds \int_{x_j}^{x_{j+1}} dx \int_{x_j}^{x_{j+1}} s^\gamma ds \leq \\ &\leq 4 \int_{x_j}^{x_{j+1}} s^\gamma |Bf(s)|^2 ds \int_{x_j}^{x_{j+1}} dx \int_{x_j}^{x_{j+1}} ds = \\ &= 4(x_{j+1} - x_j)^2 \int_{x_j}^{x_{j+1}} s^\gamma |Bf(s)|^2 ds. \end{aligned}$$

Окончательно для I_2 получим

$$\int_{x_j}^{x_{j+1}} x^\gamma |D(\tilde{f}(x) - f(x))|^2 dx \leq 4h^2 \int_{x_j}^{x_{j+1}} s^\gamma |Bf(s)|^2 ds. \quad (3.1.16)$$

Тогда утверждение теоремы следует из (3.1.15), (3.1.16). \square

3.1.4. Сплайн–интерполяция в пространстве $H_\gamma^2(0, 1)$

Введем на отрезке $[0, 1]$ равномерную сетку $x_i = ih, i = \overline{0, n}$. Рассмотрим оператор:

$$L = -x^{-\gamma} \frac{d}{dx} \left(x^\gamma p(x) \frac{d}{dx} \right).$$

Функции ϕ определяются из предположения, что

$$x^{-\gamma} \frac{d}{dx} \left(x^\gamma \frac{d\phi}{dx} \right) = 0.$$

Отсюда $\phi = C_1 x^{1-\gamma} + C_2$ для $\gamma \neq 1$ и $\phi = C_1 \ln(x) + C_2, \gamma = 1$.

Каждому узлу сетки x_i поставим в соответствие кусочную функцию с носителем из (x_{i-1}, x_{i+1}) , такую что $\phi(x_i) = 1, \phi(x_{i-1}) = \phi(x_{i+1}) = 0$. Для

отрезка $[x_{i-1}, x_i]$ и $\gamma \neq 1$:

$$\begin{cases} \phi_i(x_{i-1}) = C_1 x_{i-1}^{1-\gamma} + C_2 = 0, \\ \phi_i(x_i) = C_1 x_i^{1-\gamma} + C_2 = 1. \end{cases}$$

Подстановка найденных из системы констант C_1, C_2 в $\phi = C_1 x^{1-\gamma} + C_2$ приводит к выражению

$$\phi_i(x) = \frac{x^{1-\gamma} - x_{i-1}^{1-\gamma}}{x_i^{1-\gamma} - x_{i-1}^{1-\gamma}}, x \in [x_{i-1}, x_i].$$

Аналогично определяя вид функции для правого отрезка $[x_i, x_{i+1}]$, можем записать кусочную функцию $\phi_i(x)$ для $\gamma \neq 1$:

$$\phi_i(x) = \begin{cases} \frac{x^{1-\gamma} - x_{i-1}^{1-\gamma}}{x_i^{1-\gamma} - x_{i-1}^{1-\gamma}}, x \in [x_{i-1}, x_i], \\ \frac{x_{i+1}^{1-\gamma} - x^{1-\gamma}}{x_{i+1}^{1-\gamma} - x_i^{1-\gamma}}, x \in [x_i, x_{i+1}], \\ 0, x \notin [x_{i-1}, x_{i+1}], i = 2, \dots, n-1. \end{cases} \quad (3.1.17)$$

$$\phi_1(x) = \begin{cases} 1, x \in [0, x_1], \\ \frac{x_2^{1-\gamma} - x^{1-\gamma}}{x_2^{1-\gamma} - x_1^{1-\gamma}}, x \in [x_1, x_2]. \end{cases} \quad \phi_n(x) = \begin{cases} \frac{x^{1-\gamma} - x_{n-1}^{1-\gamma}}{x_n^{1-\gamma} - x_{n-1}^{1-\gamma}}, x \in [x_{n-1}, x_n], \\ 0, x \notin [x_{n-1}, x_n]. \end{cases} \quad (3.1.18)$$

Для отрезка $[x_{i-1}, x_i]$ и $\gamma = 1$ запишем

$$\begin{cases} \phi_i(x_{i-1}) = C_1 \ln(x_{i-1}) + C_2 = 0, \\ \phi_i(x_i) = C_1 \ln(x_i) + C_2 = 1. \end{cases}$$

Откуда

$$\phi_i(x) = \frac{\ln(x) - \ln(x_{i-1})}{\ln(x_i) - \ln(x_{i-1})}, x \in [x_{i-1}, x_i].$$

В общем виде функции $\phi_i(x)$ для параметра $\gamma = 1$ имеют вид:

$$\phi_i(x) = \begin{cases} \frac{\ln(x) - \ln(x_{i-1})}{\ln(x_i) - \ln(x_{i-1})}, x \in [x_{i-1}, x_i], \\ \frac{\ln(x_{i+1}) - \ln(x)}{\ln(x_{i+1}) - \ln(x_i)}, x \in [x_i, x_{i+1}], \\ 0, x \notin [x_{i-1}, x_{i+1}], i = 2, \dots, n-1. \end{cases}$$

$$\phi_1(x) = \begin{cases} 1, & x \in [x_0, x_1], \\ \frac{\ln(x_2) - \ln(x)}{\ln(x_2) - \ln(x_1)}, & x \in [x_1, x_2]. \end{cases} \quad \phi_n(x) = \begin{cases} \frac{\ln(x) - \ln(x_{n-1})}{\ln(x_n) - \ln(x_{n-1})}, & x \in [x_{n-1}, x_n], \\ 0, & x \notin [x_{n-1}, x_n]. \end{cases}$$

Рассмотрим $f \in \overset{\circ}{H}_\gamma^2(0, 1)$, т.е. функцию из пространства $H_\gamma^2(0, 1)$, удовлетворяющую краевым условиям. Пусть

$$\tilde{f} = \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) \phi_i(x). \quad (3.1.19)$$

Функцию \tilde{f} будем называть сплайн-интерполянт функции f . Исследуем разность $\tilde{f}(x) - f(x)$.

На отрезке $[x_i, x_{i+1}]$ $\phi_i = \psi_2$, $\phi_{i+1} = \psi_1$, $i = \overline{1, n-1}$, где функции ψ_1, ψ_2 определены формулами (3.1.7)-(3.1.8). Следовательно, для каждого отрезка $[x_i, x_{i+1}]$ справедлива оценка, вытекающая из неравенства (3.1.12) Теоремы 3.1.3:

$$\|f - \tilde{f}\|_{H_\gamma^1(x_i, x_{i+1})} \leq ch \|f\|_{H_\gamma^2(x_i, x_{i+1})}. \quad (3.1.20)$$

Также из Теоремы 3.1.2 следует:

$$\|f(x) - \tilde{f}(x)\|_{H_\gamma^1(0, x_1)} \leq ch \|f\|_{H_\gamma^2(0, x_1)}. \quad (3.1.21)$$

Учитывая (3.1.21), (3.1.20), получим следующий результат.

Теорема 3.1.4. Пусть $f \in H_\gamma^2(0, 1)$, \tilde{f} — сплайн-интерполянт функции f , заданный по формуле (3.1.19). Тогда справедлива оценка погрешности интерполяции

$$\|f(x) - \tilde{f}(x)\|_{H_\gamma^1(0, 1)} \leq ch \|f\|_{H_\gamma^2(0, 1)}, \quad (3.1.22)$$

где c не зависит от функции f и от h .

3.1.5. Применение метода Ритца в энергетическом пространстве к сингулярной стационарной модели

Одномерная стационарная сингулярная модель распределения субстанции со степенным вырождением состоит из соотношения (уравнения)

$$-x^{-\gamma} \frac{d}{dx} \left(x^{\gamma} p(x) \frac{du}{dx} \right) + q(x)u(x) = f(x), \quad (3.1.23)$$

и краевых условий

$$\frac{du}{dx} \Big|_{x=0} = 0, \quad (3.1.24)$$

$$u(1) = 0. \quad (3.1.25)$$

Далее предполагаем, что $p(x) \in C^1[0, 1]$, $q(x) \in C[0, 1]$, $f \in L_{2,\gamma}(0, 1)$, $p(x) \geq p_0 > 0$, $q(x) \geq 0$, $p_0 = \text{const}$, $\forall x \in [0, 1]$. Параметр $\gamma > 0$, $\gamma \neq 1$.

Обозначим, участвующий в уравнении (3.1.23) оператор через L , т.е.

$$Lu = -x^{-\gamma} \frac{d}{dx} \left(x^{\gamma} p(x) \frac{du}{dx} \right) + q(x)u(x).$$

Будем рассматривать задачу в гильбертовом пространстве $H = L_{2,\gamma}(0, 1)$ в виде операторного уравнения

$$Lu = f. \quad (3.1.26)$$

Тогда область определения $D(L)$ оператора L состоит из непрерывных функций $u(x)$, удовлетворяющих условиям (3.1.24)-(3.1.25), и таких что, $Lu \in L_{2,\gamma}(0, 1)$. Производная $u'_x \in L_{2,\gamma}(0, 1)$.

В рассматриваемом пространстве скалярное произведение и норма задаются следующим образом:

$$(u, v)_{L_{2,\gamma}(0,1)} = \int_0^1 x^{\gamma} u(x)v(x)dx,$$

$$\|f\|_{L_{2,\gamma}(0,1)} = \left(\int_0^1 x^{\gamma} f^2(x) dx \right)^{\frac{1}{2}}.$$

Покажем, что оператор L является симметричным.

$$\begin{aligned} (Lu, v) &= \int_0^1 \left(-x^\gamma x^{-\gamma} \frac{d}{dx} \left(x^\gamma p(x) \frac{du}{dx} \right) v + x^\gamma q(x) uv \right) dx = \\ &= -x^\gamma p \frac{du}{dx} v \Big|_0^1 + \int_0^1 x^\gamma \left(p(x) \frac{du}{dx} \frac{dv}{dx} + q(x) uv \right) dx, u, v \in D(L). \end{aligned}$$

Внеинтегральный член $-x^\gamma p \frac{du}{dx} v \Big|_0^1 = 0$ в силу краевых условий (3.1.24)-(3.1.25).

Тогда

$$(Lu, v) = \int_0^1 x^\gamma \left(p(x) \frac{du}{dx} \frac{dv}{dx} + q(x) uv \right) dx = (Lv, u).$$

Покажем теперь положительную определенность оператора L , т.е.

$$\theta^2 \|u\|^2 \leq (Lu, u), u \in D(L), \quad (3.1.27)$$

где $\theta > 0$ не зависит от $u(x)$.

Воспользуемся неравенством Фридрихса. Для рассматриваемой задачи функция $u(x)$ имеет на $(0, 1)$ суммируемую с квадратом производную u'_x и в точке $x = 1$ принимает нулевое значение, тогда верна оценка

$$\|u\|_{L_{2,\gamma}} \leq c \left\| \frac{du}{dx} \right\|_{L_{2,\gamma}}. \quad (3.1.28)$$

Запишем с учетом $u(1) = 0$:

$$u(x) = - \int_x^1 u'(\xi) d\xi,$$

$$u^2(x) = \left(\int_x^1 u'(\xi) \xi^{-\gamma/2} \xi^{\gamma/2} d\xi \right)^2.$$

С использованием неравенства Коши-Буняковского для $0 \leq x \leq 1$:

$$\begin{aligned} u^2(x) &\leq \left(\int_x^1 (u'(\xi))^2 \xi^\gamma d\xi \right) \left(\int_x^1 \xi^{-\gamma} d\xi \right) \leq \left(\int_0^1 (u'(\xi))^2 \xi^\gamma d\xi \right) \frac{\xi^{1-\gamma}}{1-\gamma} \Big|_x^1 = \\ &= \|u'\|_{L_{2,\gamma}}^2 \frac{1-x^{1-\gamma}}{1-\gamma}. \end{aligned}$$

Проинтегрируем от 0 до 1 с весом x^γ :

$$\begin{aligned} \|u\|_{L_{2,\gamma}}^2 &\leq \|u'\|_{L_{2,\gamma}}^2 \int_0^1 \frac{x^\gamma(1-x^{1-\gamma})}{1-\gamma} dx = \|u'\|_{L_{2,\gamma}}^2 \frac{1}{1-\gamma} \left(\frac{x^{\gamma+1}}{\gamma+1} - \frac{x^2}{2} \right) \Big|_0^1 = \\ &= \|u'\|_{L_{2,\gamma}}^2 \frac{1}{2(1+\gamma)}. \end{aligned} \quad (3.1.29)$$

Из последнего неравенства находим $c^2 = 1/2(1+\gamma)$.

Запишем неравенство (3.1.28) с учетом (3.1.29):

$$\|u\|^2 \leq \frac{1}{2(1+\gamma)} \left(\frac{du}{dx}, \frac{du}{dx} \right) \leq \frac{1}{2p_0(1+\gamma)} \left(p \frac{du}{dx}, \frac{du}{dx} \right) \leq \frac{1}{2p_0(1+\gamma)} (Lu, u).$$

Таким образом, константа θ^2 , входящая в оценку (3.1.27) равна $2p_0(1+\gamma)$.

Приведенные свойства оператора L гарантируют существование обратного оператора L^{-1} , что означает однозначную разрешимость уравнения (3.1.26). Поскольку L — симметричный и положительно определенный оператор, поэтому для решения задачи естественно применить метод Рунца в энергетических пространствах [35].

Умножим уравнение (3.1.23) на x^γ и на функцию v из пространства $H_\gamma^1(0, 1)$, а затем проинтегрируем от 0 до 1. Получим

$$(Lu, v)_{L_{2,\gamma}} = \int_0^1 \left(-x^\gamma x^{-\gamma} \frac{d}{dx} \left(x^\gamma p(x) \frac{du}{dx} \right) v + x^\gamma q(x) uv \right) dx = \int_0^1 x^\gamma f v dx.$$

Применяя интегрирование по частям, получим

$$-x^\gamma p \frac{du}{dx} v \Big|_0^1 + \int_0^1 x^\gamma \left(p(x) \frac{du}{dx} \frac{dv}{dx} + q(x) uv \right) dx = \int_0^1 x^\gamma f v dx.$$

С учетом краевых условий (3.1.24)-(3.1.25):

$$\int_0^1 x^\gamma \left(p(x) \frac{du}{dx} \frac{dv}{dx} + q(x) uv \right) dx = \int_0^1 x^\gamma f v dx. \quad (3.1.30)$$

Следовательно энергетическое пространство H_L имеет следующие скаляр-

ное произведение и норму соответственно

$$[u, v] = \int_0^1 x^\gamma \left(p(x) \frac{du}{dx} \frac{dv}{dx} + q(x)uv \right) dx, \quad (3.1.31)$$

$$[u] = [u, u]^{\frac{1}{2}}.$$

В нашей задаче энергетическое пространство совпадает с пространством $\overset{\circ}{H}_\gamma^1(0, 1)$. В соответствии с ограничениями на p и q справедливо:

$$c_0 \|u\|_{H_\gamma^1(0,1)} \leq [u] \leq c_1 \|u\|_{H_\gamma^1(0,1)}.$$

Метод Ритца основан на задаче отыскания минимума квадратичного функционала вида

$$F(u) = (Lu, u) - 2(u, f), \quad (3.1.32)$$

на множестве $D(L)$, являющимся также областью определения $F(u)$. Известна следующая теорема.

Теорема 3.1.5. Для того, чтобы элемент $u_0 \in D(L)$ сообщал минимум функционалу энергии $F(u)$, необходимо и достаточно, чтобы этот элемент удовлетворял уравнению $Lu_0 = f$. Такой элемент единственный.

Отсюда следует, что задача (3.1.32) и задача (3.1.26) эквивалентны. С учетом (3.1.31) представим $F(u)$ в виде

$$F(u) = [u, u] - 2(u, f).$$

Тогда $F(u)$ можно рассматривать не только на области $D(L)$, но и на всех элементах H_L . В такой постановке решение также единственно.

Условие $u(x) \in D(L)$ требует наличия у функции $u(x)$ второй производной, которая принадлежит $L_{2,\gamma}(0, 1)$. Если принять $u(x) \in H_L$, то необходимо наличие только первой производной $du/dx \in L_{2,\gamma}(0, 1)$.

Принадлежность функции u к области определения $D(L)$ оператора L подразумевает, что эта функция будет удовлетворять краевым условиям. Пусть T_k — это оператор, определяющий k -ое краевое условие. Тогда $T_k u = 0$. В результате пополнения пространства H_L по норме $[\cdot]$ в полученном энергетическом пространстве могут оказаться элементы, которые не удовлетворяют некоему

условию $T_k u = 0$. Если в пространстве H_L окажутся элементы, не удовлетворяющие условию $T_k u = 0$, то это краевое условие называется естественным для оператора L . Иначе, краевое условие, которому удовлетворяют элементы из $D(L)$ и элементы из H_L , называется главным.

Приведем признак, позволяющий определять тип краевого условия. Пусть L — дифференциальный оператор порядка $2m$, удовлетворяющий краевому условию $T_k u = 0$. Тогда это краевое является естественным, если $T_k u$ содержит производные функции u порядка m и выше. Если выражение $T_k u$ не содержит производных u порядка m и выше, то условие $T_k u = 0$ является главным.

Таким образом, функции из пространства H_L удовлетворяют главному условию $u(1) = 0$. В то же время среди них могут быть функции, которые не удовлетворяют естественному условию $\left. \frac{du}{dx} \right|_{x=0} = 0$.

Равенство (3.1.30) лежит в основе определения слабого решения.

Определение 3.1.2. Слабым решением задачи (3.1.23)-(3.1.25) будем называть функцию $u \in \overset{\circ}{H}_\gamma^1(0, 1)$, если $\forall v \in \overset{\circ}{H}_\gamma^1(0, 1)$ справедливо равенство (3.1.30).

Если функция u является классическим решением (3.1.23)-(3.1.25), то она является и слабым решением, обратное неверно, поскольку слабое решение может не иметь непрерывной второй производной, и тогда выражение (3.1.23) не имеет смысла.

В [15] доказано, что слабое решение задачи (3.1.23)-(3.1.25) принадлежит пространству $H_\gamma^2(0, 1)$ и удовлетворяет неравенству:

$$\|u\|_{H_\gamma^2(0,1)} \leq c \|f\|_{L_{2,\gamma}(0,1)}. \quad (3.1.33)$$

Согласно методу Рунге приближение слабого решения задачи будем искать в виде $u_h = \sum_{i=0}^n a_i \phi_i$, где ϕ_i — базисные функции.

Пусть заданы линейно независимые функции $\{\phi_i\} \subset H_L$, определенные в подразделе 4 этого раздела. Обозначим их линейную оболочку H_n . Т.к. каждая функция $\phi_i \in \overset{\circ}{H}_\gamma^1(0, 1)$, то $H_n \subset \overset{\circ}{H}_\gamma^1(0, 1)$.

Потребуем, чтобы u_h удовлетворяло краевым условиям задачи, т.е. $\left. \frac{du_h}{dx} \right|_{x=0} = 0$, $u_h(1) = 0$. Тогда удовлетворяющее данным требованиям решение запишется в виде

$$u_h = \sum_{i=1}^{n-1} a_i \phi_i.$$

3.1.6. Абстрактная оценка ошибки в одномерной стационарной сингулярной модели

Известна теорема Лакса–Мильграма [48], согласно которой, задача

$$a(u, v) = f(v), \forall v \in H \quad (3.1.34)$$

имеет единственное решение $u \in H$ при введенных предположениях:

1) H — гильбертово пространство и $a(\cdot, \cdot) : H \times H \rightarrow \mathbb{R}$ — непрерывная H -эллиптическая билинейная форма, т.е.

$$\begin{aligned} a(u, v) &\leq \beta \|u\| \|v\|, \\ a(u, u) &\geq \alpha \|u\|^2. \end{aligned}$$

2) $f : H \rightarrow \mathbb{R}$ — непрерывная линейная форма.

Рассмотрим семейство V_h подпространств пространства H , где параметр h принимается как определяющий параметр семейства и в пределе равен 0. Каждому пространству V_h поставим в соответствие дискретное решение $u_h \in V_h$, удовлетворяющее условию:

$$a(u_h, v_h) = f(v_h), \forall v_h \in V_h.$$

Решение u_h называется приближением по Ритцу решения задачи (3.1.34). Тогда имеет место следующая абстрактная оценка ошибки.

Теорема 3.1.6 (Лемма Сеа). Существует такая не зависящая от подпространства V_h постоянная C , что

$$\|u - u_h\| \leq c \inf_{v_h \in V_h} \|u - v_h\|.$$

Очевидно, что для нашей задачи билинейная форма удовлетворяет неравенствам

$$\begin{aligned} |L(u, v)| &\leq \beta \|u\|_{H_\gamma^1(0,1)} \|v\|_{H_\gamma^1(0,1)}, \\ |L(u, v)| &\geq \alpha \|u\|_{H_\gamma^1(0,1)}^2. \end{aligned}$$

Первое неравенство получается из неравенства Коши–Буняковского, второе до-

казывается с учетом $p(x) \geq p_0$ (см. доказательство формулы (3.1.27)).

Поэтому справедлива оценка, вытекающая из леммы Сеа.

$$\|u - u_h\|_{H_\gamma^1(0,1)} \leq c \inf_{v \in H_n} \|u - v\|_{H_\gamma^1(0,1)}. \quad (3.1.35)$$

Пусть $\tilde{u} \in H_n$ — интерполянт функции u . Тогда

$$\inf_{v \in H_n} \|u - v\|_{H_\gamma^1(0,1)} \leq \|u - \tilde{u}\|_{H_\gamma^1(0,1)}. \quad (3.1.36)$$

Из неравенств (3.1.35)-(3.1.36), (3.1.22), получим оценку:

$$\|u - u_h\|_{H_\gamma^1(0,1)} \leq ch \|u\|_{H_\gamma^2(0,1)}.$$

Учитывая теперь неравенство (3.1.33), запишем основной результат этого раздела:

Теорема 3.1.7. Пусть функция $u(x)$ — слабое решение задачи (3.1.23)-(3.1.25), u_h — его приближение по Ритцу. Тогда справедлива оценка погрешности метода Ритца:

$$\|u - u_h\|_{H_\gamma^1(0,1)} \leq ch \|f\|_{L_{2,\gamma}(0,1)},$$

c не зависит от f, u, h .

3.1.7. Численная реализация алгоритма построения приближенного решения по методу Ритца в одномерной сингулярной стационарной модели

Приближение по Ритцу будем искать в виде $u_h = \sum_{i=1}^{n-1} a_i \phi_i$. Подставляя это выражение в (3.1.30), получим

$$\sum_{i=1}^{n-1} a_i \int_{\Omega_{ij}} x^\gamma \left(p(x) \frac{d\phi_i}{dx} \frac{d\phi_j}{dx} + q(x) \phi_i \phi_j \right) dx = \int_{\Omega_j} x^\gamma f \phi_j dx, \quad j = 1, \dots, n-1.$$

Обозначим

$$W_{ij} = \int_{\Omega_{ij}} x^\gamma \left(p(x) \frac{d\phi_i}{dx} \frac{d\phi_j}{dx} + q(x) \phi_i \phi_j \right) dx,$$

$$F_j = \int_{\Omega_{ij}} x^\gamma f \phi_j, j = 1, \dots, n-1,$$

$$\Omega_{ij} = (0, 1) \cap \text{supp } \phi_i \cap \text{supp } \phi_j, \Omega_j = (0, 1) \cap \text{supp } \phi_j.$$

Неизвестные коэффициенты a_i будем искать из системы

$$\sum_{i=1}^{n-1} a_i W_{ij} = F_j, j = 1, \dots, n-1. \quad (3.1.37)$$

Матрица системы (3.1.37), полученная методом Рунца, сохраняет свойства симметричности и положительной определенности оператора L . Поэтому существует единственное решение $a = (a_1, \dots, a_{n-1})$, однозначно определяющее приближенное решение u_h .

Для базисных функций, определенных по формулам (3.1.17)-(3.1.18) скалярное произведение в пространстве $L_{2,\gamma}(\Omega)$ отлично от 0 только для соседних функций:

$$\int_{\Omega_{ij}} x^\gamma \phi_i \phi_j dx \begin{cases} = 0, & |i-j| > 1, \\ \neq 0, & |i-j| \leq 1. \end{cases}$$

Указанное свойство обеспечивает разреженность матрицы \widehat{W}_{ij} системы уравнений (3.1.37). Для определения вида данной матрицы нужно вычислить элементы $W_{j-1,j}, W_{j,j}, W_{j+1,j}$:

$$W_{ij} = \int_{\Omega_{ij}} x^\gamma \left(p(x) \frac{d\phi_i}{dx} \frac{d\phi_j}{dx} + q(x) \phi_i \phi_j \right) dx, i = j-1, j, j+1.$$

Заметим, что $W_{j-1,j} = W_{j,j-1}, W_{j+1,j} = W_{j,j+1}$.

Пусть $p(x), q(x)$ — кусочно-постоянные функции с конечным числом разрывов, которые совпадают с узлами сетки. $p_{i-\frac{1}{2}} = p(x), x \in (x_{i-1}, x_i), q_{i-\frac{1}{2}} = q(x), x \in (x_{i-1}, x_i)$.

Для случая $i = j-1$ базисные функции ϕ_{j-1} и ϕ_j пересекаются лишь на интервале (x_{j-1}, x_j) , поэтому элемент $W_{j,j-1}$ ищется по формуле

$$W_{j,j-1} = \int_{x_{j-1}}^{x_j} x^\gamma p \frac{d\phi_{j-1}}{dx} \frac{d\phi_j}{dx} dx + \int_{x_{j-1}}^{x_j} x^\gamma q \phi_{j-1} \phi_j dx, \quad (3.1.38)$$

где

$$\phi_{j-1}(x) = \frac{x_j^{1-\gamma} - x^{1-\gamma}}{x_j^{1-\gamma} - x_{j-1}^{1-\gamma}}, \quad \phi_j(x) = \frac{x^{1-\gamma} - x_{j-1}^{1-\gamma}}{x_j^{1-\gamma} - x_{j-1}^{1-\gamma}},$$

$$\frac{d\phi_{j-1}(x)}{dx} = \frac{(\gamma-1)x^{-\gamma}}{x_j^{1-\gamma} - x_{j-1}^{1-\gamma}}, \quad \frac{d\phi_j(x)}{dx} = \frac{(1-\gamma)x^{-\gamma}}{x_j^{1-\gamma} - x_{j-1}^{1-\gamma}}.$$

Тогда

$$\int_{x_{j-1}}^{x_j} x^\gamma p \frac{d\phi_{j-1}}{dx} \frac{d\phi_j}{dx} dx = \frac{p_{j-1/2}(1-\gamma)(\gamma-1)}{(x_j^{1-\gamma} - x_{j-1}^{1-\gamma})^2} \int_{x_{j-1}}^{x_j} x^{-\gamma} dx = \frac{p_{j-1/2}(\gamma-1)}{x_j^{1-\gamma} - x_{j-1}^{1-\gamma}},$$

$$\begin{aligned} \int_{x_{j-1}}^{x_j} x^\gamma q \phi_{j-1} \phi_j dx &= \frac{q_{j-1/2}}{(x_j^{1-\gamma} - x_{j-1}^{1-\gamma})^2} \int_{x_{j-1}}^{x_j} x^\gamma (x_j^{1-\gamma} - x^{1-\gamma})(x^{1-\gamma} - x_{j-1}^{1-\gamma}) dx = \\ &= \frac{q_{j-1/2}}{(x_j^{1-\gamma} - x_{j-1}^{1-\gamma})^2} \left(\frac{x^2(x_{j-1}^{1-\gamma} + x_j^{1-\gamma})}{2} \Big|_{x_{j-1}}^{x_j} - \right. \\ &\quad \left. - \frac{x^{\gamma+1} x_{j-1}^{1-\gamma} x_j^{1-\gamma}}{\gamma+1} \Big|_{x_{j-1}}^{x_j} - \frac{x^{3-\gamma}}{3-\gamma} \Big|_{x_{j-1}}^{x_j} \right) = \\ &= \frac{q_{j-1/2}}{(x_j^{1-\gamma} - x_{j-1}^{1-\gamma})^2} \left(\frac{(x_j^{3-\gamma} - x_{j-1}^{3-\gamma})(1-\gamma)}{2(3-\gamma)} + \frac{(\gamma-1)(x_j^2 x_{j-1}^{1-\gamma} - x_{j-1}^2 x_j^{1-\gamma})}{2(\gamma+1)} \right). \end{aligned}$$

Тогда (3.1.38) окончательно записывается в виде:

$$\begin{aligned} W_{j,j-1} &= \frac{p_{j-1/2}(\gamma-1)}{x_j^{1-\gamma} - x_{j-1}^{1-\gamma}} + \frac{q_{j-1/2}}{(x_j^{1-\gamma} - x_{j-1}^{1-\gamma})^2} \times \\ &\quad \times \left(\frac{(x_j^{3-\gamma} - x_{j-1}^{3-\gamma})(1-\gamma)}{2(3-\gamma)} + \frac{(\gamma-1)(x_j^2 x_{j-1}^{1-\gamma} - x_{j-1}^2 x_j^{1-\gamma})}{2(\gamma+1)} \right). \quad (3.1.39) \end{aligned}$$

Для случая $i = j$ интегрирование ведется по двум интервалам (x_{j-1}, x_j)

и (x_j, x_{j+1}) .

$$W_{j,j} = \int_{x_{j-1}}^{x_j} x^\gamma p \frac{d\phi_j}{dx} \frac{d\phi_j}{dx} dx + \int_{x_{j-1}}^{x_j} x^\gamma q \phi_j \phi_j dx + \int_{x_j}^{x_{j+1}} x^\gamma p \frac{d\phi_j}{dx} \frac{d\phi_j}{dx} dx + \int_{x_j}^{x_{j+1}} x^\gamma q \phi_j \phi_j dx. \quad (3.1.40)$$

$$\int_{x_{j-1}}^{x_j} x^\gamma p \frac{d\phi_j}{dx} \frac{d\phi_j}{dx} dx = \frac{p_{j-1/2}(1-\gamma)^2}{\left(x_j^{1-\gamma} - x_{j-1}^{1-\gamma}\right)^2} \int_{x_{j-1}}^{x_j} x^{-\gamma} dx = \frac{p_{j-1/2}(1-\gamma)}{x_j^{1-\gamma} - x_{j-1}^{1-\gamma}},$$

$$\int_{x_{j-1}}^{x_j} x^\gamma q \phi_j \phi_j dx = \frac{q_{j-1/2}}{\left(x_j^{1-\gamma} - x_{j-1}^{1-\gamma}\right)^2} \int_{x_{j-1}}^{x_j} x^\gamma (x^{1-\gamma} - x_{j-1}^{1-\gamma})^2 dx =$$

$$= \frac{q_{j-1/2}}{\left(x_j^{1-\gamma} - x_{j-1}^{1-\gamma}\right)^2} \left(\frac{x^{3-\gamma}}{3-\gamma} \Big|_{x_{j-1}}^{x_j} - x^2 x_{j-1}^{1-\gamma} \Big|_{x_{j-1}}^{x_j} + \frac{x^{\gamma+1} x_{j-1}^{2-2\gamma}}{\gamma+1} \Big|_{x_{j-1}}^{x_j} \right) =$$

$$= \frac{q_{j-1/2}}{\left(x_j^{1-\gamma} - x_{j-1}^{1-\gamma}\right)^2} \left(\frac{x_j^{3-\gamma}}{3-\gamma} - \frac{x_{j-1}^{3-\gamma}(\gamma-1)^2}{(3-\gamma)(\gamma+1)} - x_{j-1}^{1-\gamma} x_j^2 + \frac{x_{j-1}^{2-2\gamma} x_j^{\gamma+1}}{\gamma+1} \right),$$

$$\int_{x_j}^{x_{j+1}} x^\gamma p \frac{d\phi_j}{dx} \frac{d\phi_j}{dx} dx = \frac{p_{j+1/2}(1-\gamma)^2}{\left(x_{j+1}^{1-\gamma} - x_j^{1-\gamma}\right)^2} \int_{x_j}^{x_{j+1}} x^{-\gamma} dx = \frac{p_{j+1/2}(1-\gamma)}{x_{j+1}^{1-\gamma} - x_j^{1-\gamma}},$$

$$\int_{x_j}^{x_{j+1}} x^\gamma q \phi_j \phi_j dx = \frac{q_{j+1/2}}{\left(x_{j+1}^{1-\gamma} - x_j^{1-\gamma}\right)^2} \int_{x_j}^{x_{j+1}} x^\gamma (x_{j+1}^{1-\gamma} - x^{1-\gamma})^2 dx =$$

$$= \frac{q_{j+1/2}}{\left(x_{j+1}^{1-\gamma} - x_j^{1-\gamma}\right)^2} \left(\frac{x^{3-\gamma}}{3-\gamma} \Big|_{x_j}^{x_{j+1}} - x^2 x_{j+1}^{1-\gamma} \Big|_{x_j}^{x_{j+1}} + \frac{x^{\gamma+1} x_{j+1}^{2-2\gamma}}{\gamma+1} \Big|_{x_j}^{x_{j+1}} \right) =$$

$$= \frac{q_{j+1/2}}{\left(x_{j+1}^{1-\gamma} - x_j^{1-\gamma}\right)^2} \left(\frac{x_{j+1}^{3-\gamma}(1-\gamma)^2}{(3-\gamma)(\gamma+1)} - \frac{x_j^{3-\gamma}}{3-\gamma} + x_{j+1}^{1-\gamma}x_j^2 - \frac{x_j^{1+\gamma}x_{j+1}^{2-2\gamma}}{\gamma+1} \right).$$

Перепишем (3.1.40) в виде

$$\begin{aligned} W_{j,j} &= \frac{p_{j-1/2}(1-\gamma)}{x_j^{1-\gamma} - x_{j-1}^{1-\gamma}} + \frac{p_{j+1/2}(1-\gamma)}{x_{j+1}^{1-\gamma} - x_j^{1-\gamma}} + \\ &+ \frac{q_{j-1/2}}{\left(x_j^{1-\gamma} - x_{j-1}^{1-\gamma}\right)^2} \left(\frac{x_j^{3-\gamma}}{3-\gamma} + \frac{x_{j-1}^{3-\gamma}(\gamma-1)^2}{(3-\gamma)(\gamma+1)} - x_{j-1}^{1-\gamma}x_j^2 + \frac{x_{j-1}^{2-2\gamma}x_j^{\gamma+1}}{\gamma+1} \right) + \\ &+ \frac{q_{j+1/2}}{\left(x_{j+1}^{1-\gamma} - x_j^{1-\gamma}\right)^2} \left(\frac{x_{j+1}^{3-\gamma}(1-\gamma)^2}{(3-\gamma)(\gamma+1)} + \frac{x_j^{3-\gamma}}{3-\gamma} + x_{j+1}^{1-\gamma}x_j^2 + \frac{x_j^{1+\gamma}x_{j+1}^{2-2\gamma}}{\gamma+1} \right). \end{aligned} \quad (3.1.41)$$

Для $i = j+1$ базисные функции ϕ_{j+1} и ϕ_j пересекаются лишь на интервале (x_j, x_{j+1}) , поэтому элемент $W_{j,j+1}$ ищется по формуле

$$W_{j,j+1} = \int_{x_j}^{x_{j+1}} x^\gamma p \frac{d\phi_j}{dx} \frac{d\phi_{j+1}}{dx} dx + \int_{x_j}^{x_{j+1}} x^\gamma q \phi_{j+1} \phi_j dx, \quad (3.1.42)$$

$$\int_{x_j}^{x_{j+1}} x^\gamma p \frac{d\phi_j}{dx} \frac{d\phi_{j+1}}{dx} dx = \frac{-p_{j+1/2}(1-\gamma)^2}{\left(x_{j+1}^{1-\gamma} - x_j^{1-\gamma}\right)^2} \int_{x_j}^{x_{j+1}} x^{-\gamma} dx = \frac{p_{j+1/2}(\gamma-1)}{x_{j+1}^{1-\gamma} - x_j^{1-\gamma}},$$

$$\begin{aligned} \int_{x_j}^{x_{j+1}} x^\gamma q \phi_{j+1} \phi_j dx &= \frac{q_{j+1/2}}{\left(x_{j+1}^{1-\gamma} - x_j^{1-\gamma}\right)^2} \int_{x_j}^{x_{j+1}} x^\gamma (x_{j+1}^{1-\gamma} - x^{1-\gamma})(x^{1-\gamma} - x_j^{1-\gamma}) dx = \\ &= \frac{q_{j+1/2}}{\left(x_{j+1}^{1-\gamma} - x_j^{1-\gamma}\right)^2} \left(\frac{x^2(x_{j+1}^{1-\gamma} + x_j^{1-\gamma})}{2} \Big|_{x_j}^{x_{j+1}} - \frac{x^{\gamma+1}x_{j+1}^{1-\gamma}x_j^{1-\gamma}}{\gamma+1} \Big|_{x_j}^{x_{j+1}} - \frac{x^{3-\gamma}}{3-\gamma} \Big|_{x_j}^{x_{j+1}} \right) = \end{aligned}$$

$$= \frac{q_{j+1/2}}{\left(x_{j+1}^{1-\gamma} - x_j^{1-\gamma}\right)^2} \left(\frac{(x_{j+1}^{3-\gamma} - x_j^{3-\gamma})(1-\gamma)}{2(3-\gamma)} + \frac{(\gamma-1)(x_{j+1}^2 x_j^{1-\gamma} - x_j^2 x_{j+1}^{1-\gamma})}{2(\gamma+1)} \right).$$

Перепишем (3.1.42):

$$W_{j,j+1} = \frac{p_{j+1/2}(\gamma-1)}{x_{j+1}^{1-\gamma} - x_j^{1-\gamma}} + \frac{q_{j+1/2}}{\left(x_{j+1}^{1-\gamma} - x_j^{1-\gamma}\right)^2} \times \\ \times \left(\frac{(x_{j+1}^{3-\gamma} - x_j^{3-\gamma})(1-\gamma)}{2(3-\gamma)} + \frac{(\gamma-1)(x_{j+1}^2 x_j^{1-\gamma} - x_j^2 x_{j+1}^{1-\gamma})}{2(\gamma+1)} \right). \quad (3.1.43)$$

Введем обозначения

$$a_j^1 = \left(\frac{x_j^{3-\gamma}}{3-\gamma} - \frac{x_{j-1}^{3-\gamma}(\gamma-1)^2}{(3-\gamma)(\gamma+1)} - x_{j-1}^{1-\gamma} x_j^2 + \frac{x_{j-1}^{2-2\gamma} x_j^{\gamma+1}}{\gamma+1} \right), \\ a_j^2 = \left(\frac{x_{j+1}^{3-\gamma}(1-\gamma)^2}{(3-\gamma)(\gamma+1)} - \frac{x_j^{3-\gamma}}{3-\gamma} + x_{j+1}^{1-\gamma} x_j^2 - \frac{x_j^{1+\gamma} x_{j+1}^{2-2\gamma}}{\gamma+1} \right), \\ b_j = \left(\frac{(x_j^{3-\gamma} - x_{j-1}^{3-\gamma})(1-\gamma)}{2(3-\gamma)} + \frac{(\gamma-1)(x_j^2 x_{j-1}^{1-\gamma} - x_{j-1}^2 x_j^{1-\gamma})}{2(\gamma+1)} \right), \\ c_j = \left(\frac{(x_{j+1}^{3-\gamma} - x_j^{3-\gamma})(1-\gamma)}{2(3-\gamma)} + \frac{(\gamma-1)(x_{j+1}^2 x_j^{1-\gamma} - x_j^2 x_{j+1}^{1-\gamma})}{2(\gamma+1)} \right).$$

Нетрудно заметить, что $b_2 = c_1, b_3 = c_2, \dots, b_{n-1} = c_{n-2}$, т.е. матрица имеет симметричный вид.

Кроме того, поскольку базисная функция $\phi_1 = 1$ на отрезке $[0, x_1]$, элемент W_{11} примет вид:

$$W_{1,1} = \frac{p_{3/2}(1-\gamma)}{x_2^{1-\gamma} - x_1^{1-\gamma}} + \frac{q_{1/2} x_1^{\gamma+1}}{\gamma+1} + \\ + \frac{q_{3/2}}{\left(x_2^{1-\gamma} - x_1^{1-\gamma}\right)^2} \left(\frac{x_2^{3-\gamma}(1-\gamma)^2}{(3-\gamma)(\gamma+1)} + \frac{x_1^{3-\gamma}}{3-\gamma} + x_2^{1-\gamma} x_1^2 + \frac{x_1^{1+\gamma} x_2^{2-2\gamma}}{\gamma+1} \right). \quad (3.1.44)$$

Обозначая $h_i = x_i^{1-\gamma} - x_{i-1}^{1-\gamma}$, запишем матрицу

$$\widehat{W} = (1 - \gamma) \begin{pmatrix} \frac{p_{3/2}}{h_2} & -\frac{p_{3/2}}{h_2} & & & & \\ & -\frac{p_{3/2}}{h_2} & & & & \\ & & \ddots & & & \\ & & & -\frac{p_{n-3/2}}{h_{n-1}} & & \\ & & & -\frac{p_{n-3/2}}{h_{n-1}} & \frac{p_{n-3/2}}{h_{n-1}} & \\ & & & & & +\frac{p_{n-1/2}}{h_n} \end{pmatrix} +$$

$$+ \begin{pmatrix} \frac{q_{3/2}}{h_2^2} a_1^2 + \frac{q_{1/2}}{\gamma+1} x_1^{\gamma+1} & \frac{q_{3/2}}{h_2^2} c_1 & & & & \\ & \frac{q_{3/2}}{h_2^2} b_2 & & & & \\ & & \ddots & & & \\ & & & \frac{q_{n-3/2}}{h_{n-1}^2} c_{n-2} & & \\ & & & \frac{q_{3/2}}{h_2^2} b_{n-1} & \frac{q_{n-1/2}}{h_2^2} a_{n-1}^2 + \frac{q_{n-3/2}}{h_1^2} a_{n-1}^1 & \end{pmatrix}.$$

3.2. Нестационарная одномерная сингулярная модель распространения субстанции

3.2.1. Математическая формализация одномерной нестационарной сингулярной модели распространения субстанции

Рассмотрим математическую модель распространения субстанции, состоящую из соотношения (уравнения)

$$\frac{\partial u}{\partial t} + Lu = f, \quad (3.2.1)$$

начального условия

$$u(x, 0) = u_{(0)} \quad (3.2.2)$$

и краевых условий

$$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{x=0} = 0, \quad u(1) = 0, \quad (3.2.3)$$

где $x \in \Omega = (0, 1)$, $t \in [0, T]$, $u_{(0)} = u_{(0)}(x)$.

Оператор L имеет вид:

$$Lu = -x^{-\gamma} \frac{\partial}{\partial x} \left(x^\gamma p(x) \frac{\partial u}{\partial x} \right) + q(x)u,$$

$p(x) \in C^1[0, 1]$ и $q(x) \in C[0, 1]$, $p(x) \geq p_0 > 0$, $q(x) \geq 0$, $p_0 = \text{const}$; с областью определения

$$D(L) = \left\{ v : v \in L_{2,\gamma}, Lv \in L_{2,\gamma}, \frac{\partial v}{\partial x} \in L_{2,\gamma}, \frac{\partial v}{\partial x}(0) = v(1) = 0 \right\}.$$

Параметр $\gamma > 0$, $\gamma \neq 1$.

Через $H_L = H_\gamma^1(\Omega)$ обозначим энергетическое пространство, соответствующее L . Скалярное произведение и норма в энергетическом пространстве H_L имеют вид (3.1.31).

На множестве $(0, T) \times \Omega$ нормы в пространствах $L_{2,\gamma}$ и H_γ^1 заданы соответственно следующим образом:

$$\|v\|_{L_{2,\gamma}((0,T) \times \Omega)}^2 = \int_0^T \int_0^1 |v(x,t)|^2 x^\gamma dx dt,$$

$$\|v\|_{H_\gamma^1((0,T) \times \Omega)}^2 = \int_0^T \int_0^1 x^\gamma \left(|v(x,t)|^2 + \left| \frac{\partial v}{\partial t} \right|^2 + \left| \frac{\partial v}{\partial x} \right|^2 \right) dx dt.$$

Произвольно выберем функцию $v(x, t)$ из пространства $H_\gamma^1((0, T) \times \Omega)$, удовлетворяющую условиям $v(x, T) = 0$ и $v(1, t) = 0$. Умножим (3.2.1) на $x^\gamma v$, проинтегрируем по области $(0, T) \times \Omega$:

$$\int_0^T \left[\int_0^1 x^\gamma \frac{\partial u}{\partial t} v dx + \int_0^1 \left(-\frac{\partial}{\partial x} \left(x^\gamma p \frac{\partial u}{\partial x} \right) v + x^\gamma q u v \right) dx - \int_0^1 x^\gamma f v dx \right] dt = 0.$$

Рассмотрим первый интеграл, входящий в полученное равенство.

$$\begin{aligned} \int_0^T \int_0^1 x^\gamma \frac{\partial u}{\partial t} v dx dt &= \int_0^1 x^\gamma \int_0^T \frac{\partial u}{\partial t} v dt dx = \int_0^1 x^\gamma \left(uv \Big|_0^T - \int_0^T \frac{\partial v}{\partial t} u dt \right) dx = \\ &= \int_0^1 x^\gamma \left(-u(x, 0)v(x, 0) - \int_0^T \frac{\partial v}{\partial t} u dt \right) dx = - \int_0^T \left(u, \frac{\partial v}{\partial t} \right) dt - (u_{(0)}, v(x, 0)). \end{aligned}$$

После применения интегрирования по частям, второй интеграл запишется по формуле:

$$\int_0^T \int_0^1 \left(-\frac{\partial}{\partial x} \left(x^\gamma p \frac{\partial u}{\partial x} \right) v + x^\gamma q u v \right) dx dt = \int_0^T \left[-v x^\gamma p \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_0^1 + \int_0^1 x^\gamma \left(p \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial v}{\partial x} + q u v \right) dx \right] dt = \int_0^T [u, v] dt.$$

Тогда:

$$\int_0^T \left[- \left(u, \frac{\partial v}{\partial t} \right) + [u, v] - (f, v) \right] dt = (u_{(0)}, v(x, 0)), \quad (3.2.4)$$

где

$$(\cdot, \cdot) = (\cdot, \cdot)_{L_{2,\gamma}(\Omega)}.$$

Определение 3.2.1. Будем называть обобщенным решением задачи (3.2.1)-(3.2.3) такую функцию $u \in L_{2,\gamma}((0, T) \times \Omega)$, которая имеет производную $\partial u / \partial x \in L_{2,\gamma}((0, T) \times \Omega)$ и $\partial u(0, t) / \partial x = u(1, t) = 0$, и удовлетворяющую равенству (3.2.4) для любой функции $v \in H_\gamma^1((0, T) \times \Omega)$, такой что $v(1, t) = 0$ и $v(x, T) = 0$.

Пусть такое обобщенное решение существует и $\partial u / \partial t \in L_{2,\gamma}((0, T) \times \Omega)$. Положим $v(x, t) = w(x)\Psi(t)$, где $w(x) \in H_\gamma^1(\Omega)$, $w(1) = 0$, $d\Psi/dt \in L_{2,\gamma}(0, T)$, $\Psi(T) = 0$.

Для $v(x, t) = w(x)\Psi(t)$:

$$\begin{aligned} \int_0^T - \left(u, \frac{\partial v}{\partial t} \right) dt &= - \int_0^1 x^\gamma w(x) \int_0^T u \frac{d\Psi}{dt} dt dx = - \int_0^1 x^\gamma w(x) \left(u \Psi \Big|_0^T - \right. \\ &\left. - \int_0^T \Psi \frac{\partial u}{\partial t} dt \right) dx = \int_0^T \Psi(t) \left(\frac{\partial u}{\partial t}, w \right) dt - \int_0^1 x^\gamma w(x) \left(u(x, T) \Psi(T) - \right. \\ &\left. - u(x, 0) \Psi(0) \right) dx = \int_0^T \Psi(t) \left(\frac{\partial u}{\partial t}, w \right) dt + \Psi(0) (u(x, 0), w). \end{aligned}$$

С учетом полученного равенства перепишем (3.2.4).

$$\int_0^T \left[\left(\frac{\partial u}{\partial t}, w \right) + [u, w] - (f, w) \right] \Psi(t) dt + \Psi(0) (u(x, 0) - u_{(0)}, w) = 0.$$

Для произвольного $\Psi(t)$ справедливо:

$$\left(\frac{\partial u}{\partial t}, w\right)(t) + [u, w](t) = (f, w)(t), \quad (3.2.5)$$

$$(u(x, 0), w) = (u_{(0)}, w). \quad (3.2.6)$$

Определение 3.2.2. Назовем обобщенным решением задачи (3.2.1)-(3.2.3) функцию $u(x, t)$, которая почти при каждом $t \in (0, T)$ принадлежит энергетическому пространству H_L , $\partial u/\partial t \in L_{2,\gamma}((0, T) \times \Omega)$ и почти всюду на $(0, T)$ удовлетворяющую равенствам (3.2.5)-(3.2.6) при любом выборе $w(x) \in H_L$.

Второе определение обобщенного решения требует уже существования $\partial u/\partial t \in L_{2,\gamma}((0, T) \times \Omega)$, однако переменная t может рассматриваться как параметр, и для аппроксимации задачи по этой переменной возможно как применение разностных методов, так и переход к (3.2.4).

3.2.2. Построение проекционно–сеточной схемы для одномерной нестационарной модели распространения

Для приближенного решения задачи (3.2.1)-(3.2.3) будем использовать определение 3.2.2. В первую очередь выполним аппроксимацию по пространственной переменной с помощью проекционно–сеточного метода, а затем осуществим приближение по времени t с использованием конечно–разностных методов.

Введем на $[0, 1]$ сетку $0 = x_0 < x_1 < \dots < x_n = 1$, $i = 1, \dots, n$, $h = x_i - x_{i-1}$. В качестве базисных функций $\{\phi_i\}$ выберем финитные функции, определенные по формулам (3.1.17)-(3.1.18).

Приближенное решение задачи будем искать в виде $u_h = \sum_{i=1}^{n-1} a_i(t)\phi_i(x)$.

Тогда коэффициенты, являющиеся функциями от $t \in (0, T)$, будем искать из системы ОДУ, полученной с помощью метода Бубнова–Галеркина из (3.2.5)-(3.2.6):

$$\left(\frac{\partial u_h}{\partial t}, \phi_i\right)(t) + [u_h, \phi_i](t) = (f, \phi_i)(t), \quad (3.2.7)$$

$$(u_h(x, 0) - u_{(0)}, \phi_i) = 0, i = 1, \dots, n - 1. \quad (3.2.8)$$

Уравнения (3.2.7)-(3.2.8) могут быть записаны в матричном виде

$$\widehat{B} \frac{da}{dt} + \widehat{A}a = F(t), \quad (3.2.9)$$

$$\widehat{B}a(0) = a_{(0)}, \quad (3.2.10)$$

$$a(t) = (a_1(t), \dots, a_{n-1}(t))^T, F(t) = (F_1(t), \dots, F_{n-1}(t))^T, F_i(t) = (f, \phi_i)(t), \\ a_{(0)} = (a_{(0),1}, \dots, a_{(0),n-1})^T, a_{(0),i} = (u_{(0)}, \phi_i), \widehat{B} = (B_{ij}), \widehat{A} = (A_{ij}).$$

$$A_{ij} = A_{ji} = [\phi_i, \phi_j] = \int_{\Omega_{ij}} x^\gamma \left(p \frac{d\phi_i}{dx} \frac{d\phi_j}{dx} + q \phi_i \phi_j \right) dx, j = 1, \dots, n-1.$$

$$B_{ij} = B_{ji} = (\phi_i, \phi_j) = \int_{\Omega_{ij}} x^\gamma \phi_i \phi_j dx.$$

$$\Omega_{ij} = (0, 1) \cap \text{supp } \phi_i \cap \text{supp } \phi_j, \Omega_j = (0, 1) \cap \text{supp } \phi_j.$$

$$F_i = \int_{\Omega_j} x^\gamma f(x, t) \phi_i dx, i = 1, \dots, n-1.$$

Матрица \widehat{B} невырождена, поскольку является матрицей Грама $\{\phi_i\}$. Для матрицы \widehat{A} в первом разделе этой главы была доказана положительная определенность, а значит она невырожденная. Тогда система (3.2.9)-(3.2.10) имеет единственное решение a , тем самым определяя единственную функцию $u_h = \sum_{i=1}^{n-1} a_i(t) \phi_i(x)$.

3.2.3. Численная реализация алгоритма построения приближенного решения в нестационарной модели

Найдем вид матриц, входящих в уравнения (3.2.9)-(3.2.10).

Элементы $A_{j,j-1}, A_{j,j}, A_{j,j+1}$ матрицы \widehat{A} определены по формулам (3.1.39), (3.1.41), (3.1.44), (3.1.43).

Аналогично для матрицы \widehat{B} выпишем вид элементов $B_{ji} = (\phi_i, \phi_j) =$

$$= (\phi_j, \phi_i) = \int_{\Omega_{ij}} x^\gamma \phi_i \phi_j dx:$$

$$B_{j,j-1} = \frac{1}{(x_j^{1-\gamma} - x_{j-1}^{1-\gamma})^2} \left(\frac{(x_j^{3-\gamma} - x_{j-1}^{3-\gamma})(1-\gamma)}{2(3-\gamma)} + \frac{(\gamma-1)(x_j^2 x_{j-1}^{1-\gamma} - x_{j-1}^2 x_j^{1-\gamma})}{2(\gamma+1)} \right), \quad (3.2.11)$$

$$B_{j,j} = \frac{1}{(x_j^{1-\gamma} - x_{j-1}^{1-\gamma})^2} \left(\frac{x_j^{3-\gamma}}{3-\gamma} - \frac{x_{j-1}^{3-\gamma}(\gamma-1)^2}{(3-\gamma)(\gamma+1)} - x_{j-1}^{1-\gamma} x_j^2 + \frac{x_{j-1}^{2-2\gamma} x_j^{\gamma+1}}{\gamma+1} \right) +$$

$$+ \frac{1}{(x_{j+1}^{1-\gamma} - x_j^{1-\gamma})^2} \left(\frac{x_{j+1}^{3-\gamma}(1-\gamma)^2}{(3-\gamma)(\gamma+1)} - \frac{x_j^{3-\gamma}}{3-\gamma} + x_{j+1}^{1-\gamma} x_j^2 - \frac{x_j^{1+\gamma} x_{j+1}^{2-2\gamma}}{\gamma+1} \right),$$

$$B_{1,1} = \frac{x_1^{\gamma+1}}{\gamma+1} + \frac{1}{(x_2^{1-\gamma} - x_1^{1-\gamma})^2} \times$$

$$\times \left(\frac{x_2^{3-\gamma}(1-\gamma)^2}{(3-\gamma)(\gamma+1)} - \frac{x_1^{3-\gamma}}{3-\gamma} + x_2^{1-\gamma} x_1^2 - \frac{x_1^{1+\gamma} x_2^{2-2\gamma}}{\gamma+1} \right), \quad (3.2.12)$$

$$B_{j,j+1} = \frac{1}{(x_{j+1}^{1-\gamma} - x_j^{1-\gamma})^2} \left(\frac{(x_{j+1}^{3-\gamma} - x_j^{3-\gamma})(1-\gamma)}{2(3-\gamma)} + \frac{(\gamma-1)(x_{j+1}^2 x_j^{1-\gamma} - x_j^2 x_{j+1}^{1-\gamma})}{2(\gamma+1)} \right). \quad (3.2.13)$$

Нетрудно убедиться, что полученные матрицы являются положительно определенными и симметричными.

Введем на $[0, T]$ равномерную сетку $t_j = j\tau, \tau = T/J, j = 0, \dots, J$.

Перепишем уравнения (3.2.9)-(3.2.10), используя для аппроксимации по времени неявную схему, имеющую первый порядок аппроксимации по τ :

$$\widehat{B}a_0 = a(0), \quad (3.2.14)$$

$$\widehat{B} \frac{a_j - a_{j-1}}{\tau} + \widehat{A}a_j = F(t_j), j = 1, \dots, J, \quad (3.2.15)$$

где $a_j = (a_{1,j}, \dots, a_{n-1,j})^T$.

Сгруппируем в (3.2.15) значения по временным слоям:

$$(\widehat{B} + \widehat{A}\tau)a_j = \tau F(t_j) + \widehat{B}a_{j-1}. \quad (3.2.16)$$

3.2.4. Оценки сходимости

Для получения априорной оценки u_h умножим каждое из уравнений (3.2.7) на функцию $a_i(t)$ и просуммируем по всем $i = 1, \dots, n-1$:

$$\left(\frac{\partial u_h}{\partial t}, \sum_{i=1}^{n-1} a_i(t) \phi_i \right) + \left[u_h, \sum_{i=1}^{n-1} a_i(t) \phi_i \right] = \left(f, \sum_{i=1}^{n-1} a_i(t) \phi_i \right),$$

а затем проинтегрируем по $t' \in (0, t)$:

$$\int_0^t \left(\frac{\partial u_h}{\partial t'}, u_h \right) dt' + \int_0^t [u_h, u_h] dt' = \int_0^t (f, u_h) dt'. \quad (3.2.18)$$

Применим интегрирование по частям к первому интегралу, стоящему в левой части последнего равенства.

$$\begin{aligned} \int_0^t \left(\frac{\partial u_h}{\partial t'}, u_h \right) dt' &= \int_0^1 \int_0^t \frac{\partial u_h}{\partial t'} u_h x^\gamma dt' dx = \left(\int_0^1 u_h x^\gamma u_h dx \right) \Big|_0^t - \\ &- \int_0^t \left(\frac{\partial u_h}{\partial t'}, u_h \right) dt' = \|u_h\|^2(t) - \|u_h\|^2(0) - \int_0^t \left(\frac{\partial u_h}{\partial t'}, u_h \right) dt'. \end{aligned}$$

Тогда

$$2 \int_0^t \left(\frac{\partial u_h}{\partial t'}, u_h \right) dt' = \|u_h\|^2(t) - \|u_h\|^2(0),$$

и (3.2.18) можно переписать в виде:

$$\frac{1}{2} \|u_h\|^2(t) + \int_0^t [u_h]^2(t') dt' = \int_0^t (f, u_h) dt' + \frac{1}{2} \|u_h\|^2(0).$$

Из (3.2.8) следует:

$$\begin{aligned} (u_h(x, 0), \phi_i) &= (u_{(0)}, \phi_i), \\ \left(u_h(x, 0), \sum_{i=1}^{n-1} a_i(0) \phi_i \right) &= \left(u_{(0)}, \sum_{i=1}^{n-1} a_i(0) \phi_i \right), \\ (u_h(x, 0), u_h(x, 0)) &= (u_{(0)}, u_h(x, 0)). \end{aligned}$$

Из последнего равенства в силу неравенства Коши–Буняковского следует, что

$\|u_h\|(0) \leq \|u_0\|$. Тогда

$$\frac{1}{2}\|u_h\|^2(t) + \int_0^t [u_h]^2(t') dt' \leq \left(\int_0^t \|f\|^2(t') dt' \right)^{\frac{1}{2}} \left(\int_0^t \|u_h\|^2(t') dt' \right)^{\frac{1}{2}} + \frac{1}{2}\|u(0)\|^2. \quad (3.2.19)$$

Поскольку

$$(Lu, v)_{L_{2,\gamma}} = [u, v] = \int_0^1 x^\gamma \left[p(x) \frac{du}{dx} \frac{dv}{dx} + q(x)uv \right] dx,$$

то

$$[u, u] = \int_0^1 x^\gamma \left[p(x) \left(\frac{du}{dx} \right)^2 + q(x)u^2 \right] dx.$$

В последней формуле отбросим неотрицательное слагаемое $q(x)u^2$, а $p(x)$ заменим на p_0 , тогда

$$[u, u] \geq p_0 \int_0^1 x^\gamma \left(\frac{du}{dx} \right)^2 dx = p_0 \|u'_x\|^2. \quad (3.2.20)$$

Ранее была доказана оценка (3.1.29):

$$\|u\|_{L_{2,\gamma}}^2 \leq \|u'\|_{L_{2,\gamma}}^2 \frac{1}{2(1+\gamma)}.$$

Подставим оценку (3.1.29) в (3.2.20), получим:

$$[u]^2 \geq 2p_0(1+\gamma)\|u\|^2.$$

Тогда справедливо следующее неравенство

$$\int_0^t \|u_h\|^2(t') dt' \leq \frac{1}{2p_0(1+\gamma)} \int_0^t [u_h]^2(t') dt' + \frac{1}{2}\|u_h\|^2(t). \quad (3.2.21)$$

С учетом оценки (3.2.21) перепишем (3.2.19):

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}\|u_h\|^2(t) + \int_0^t [u_h]^2(t')dt' &\leq \\ &\leq \left(\int_0^t \|f\|^2(t')dt' \right)^{\frac{1}{2}} A \left(\frac{1}{2}\|u_h\|^2(t) + \int_0^t [u_h]^2(t')dt' \right)^{\frac{1}{2}} + \frac{1}{2}\|u_{(0)}\|^2, \end{aligned}$$

где $A = \max\{1, 1/\sqrt{2p_0(1+\gamma)}\}$.

Для последнего соотношения применим неравенство $|ab| \leq a^2/(4\epsilon) + \epsilon b^2$:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}\|u_h\|^2(t) + \int_0^t [u_h]^2(t')dt' &\leq \frac{A^2}{4\epsilon} \int_0^t \|f\|^2(t')dt' + \\ &+ \epsilon \left(\frac{1}{2}\|u_h\|^2(t) + \int_0^t [u_h]^2(t')dt' \right) + \frac{1}{2}\|u_{(0)}\|^2, \end{aligned}$$

$$(1 - \epsilon) \left(\frac{1}{2}\|u_h\|^2(t) + \int_0^t [u_h]^2(t')dt' \right) \leq \frac{A^2}{4\epsilon} \int_0^t \|f\|^2(t')dt' + \frac{1}{2}\|u_{(0)}\|^2,$$

где $0 < \epsilon < 1$.

Тогда

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}\|u_h\|^2(t) + \frac{1}{2} \int_0^t [u_h]^2(t')dt' &\leq \frac{1}{2}\|u_h\|^2(t) + \int_0^t [u_h]^2(t')dt' \leq \\ &\leq \frac{A^2}{4\epsilon(1-\epsilon)} \int_0^t \|f\|^2(t')dt' + \frac{1}{2(1-\epsilon)}\|u_{(0)}\|^2 \leq \tilde{C} \left(\int_0^t \|f\|^2(t')dt' + \|u_{(0)}\|^2 \right), \end{aligned}$$

$$\tilde{C} = \max\{A^2/4\epsilon(1-\epsilon), 1/2(1-\epsilon)\}.$$

Из последнего соотношения получаем априорные оценки

$$\begin{aligned} \|u_h\|^2(t) + \int_0^t [u_h]^2(t')dt' &\leq C \left(\int_0^t \|f\|^2(t')dt' + \|u_{(0)}\|^2 \right), \\ \max_{t \in (0, T)} \|u_h\|^2(t) + \int_0^T [u_h]^2(t')dt' &\leq C \left(\int_0^T \|f\|^2(t')dt' + \|u_{(0)}\|^2 \right). \end{aligned} \tag{3.2.22}$$

Из неравенств (3.2.22) следует непрерывная зависимость приближенного решения u_h задачи от f и $u_{(0)}$.

Оценим скорость сходимости u_h к $u(x, t)$ при $h \rightarrow 0$. Примем $\xi_h = u - u_h$,

тогда для любой функции $v_h = \sum_{i=1}^{n-1} b_i(t)\phi_i$:

$$\left(\frac{\partial \xi_h}{\partial t}, v_h\right)(t) + [\xi_h, v_h](t) = \left(\frac{\partial u}{\partial t}, v_h\right)(t) + [u, v_h](t) - \left(\frac{\partial u_h}{\partial t}, v_h\right)(t) - [u_h, v_h](t).$$

Поскольку

$$\left(\frac{\partial u_h}{\partial t}, v_h\right)(t) + [u_h, v_h](t) = (f, v_h)(t),$$

последнее равенство можно переписать в виде

$$\left(\frac{\partial \xi_h}{\partial t}, v_h\right)(t) + [\xi_h, v_h](t) = \left(\frac{\partial u}{\partial t}, v_h\right)(t) + [u, v_h](t) - (f, v_h)(t) = 0.$$

Запишем тождества, которые справедливы для произвольной функции $v_h = \sum_{i=1}^{n-1} b_i\phi_i$, где коэффициенты являются функциями от t . Тогда

$$\left(\frac{\partial \xi_h}{\partial t}, \xi_h\right) + [\xi_h, \xi_h] = \left(\frac{\partial \xi_h}{\partial t}, u - v_h\right) + [\xi_h, u - v_h], \quad (3.2.23)$$

$$(\xi_h, v_h)(0) = 0.$$

Проинтегрируем первое слагаемое в левой части (3.2.23) по $t' \in (0, t)$, а затем применим интегрирование по частям:

$$\begin{aligned} \int_0^t \left(\frac{\partial \xi_h}{\partial t'}, \xi_h\right) dt' &= \left(\int_0^1 \xi_h x^\gamma \xi_h dx\right) \Big|_0^t - \int_0^t \left(\frac{\partial \xi_h}{\partial t'}, \xi_h\right) dt' = \\ &= \|\xi_h\|^2(t) - \|\xi_h\|^2(0) - \int_0^t \left(\frac{\partial \xi_h}{\partial t'}, \xi_h\right) dt'. \end{aligned}$$

Следовательно (3.2.23) после интегрирования по $t' \in (0, t)$ можно переписать в виде:

$$\frac{1}{2}\|\xi_h\|^2(t) + \int_0^t [\xi_h]^2 dt' = \int_0^t [\xi_h, u - v_h] dt' + \int_0^t \left(\frac{\partial \xi_h}{\partial t'}, u - v_h\right) dt' + \frac{1}{2}\|\xi_h\|^2(0). \quad (3.2.24)$$

Вычислим следующий интеграл

$$\int_0^t \left(\frac{\partial \xi_h}{\partial t}, u - v_h \right) dt' = (\xi_h, u - v_h)(t) - (\xi_h, u - v_h)(0) - \int_0^t \left(\xi_h, \frac{\partial u}{\partial t} - \frac{\partial v_h}{\partial t} \right) dt'.$$

Для (3.2.24) справедлива оценка

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \|\xi_h\|^2(t) + \int_0^t [\xi_h]^2 dt' &\leq \left(\int_0^t [\xi_h]^2 dt' \right)^{1/2} \left(\int_0^t [u - v_h]^2 dt' \right)^{1/2} + \|\xi_h(t)\| \|u - v_h\|(t) + \\ + \|\xi_h(0)\| \|u(0) - v_h(0)\| &+ \left(\int_0^t \|\xi_h\|^2 dt' \right)^{1/2} \left(\int_0^t \left\| \frac{\partial u}{\partial t} - \frac{\partial v_h}{\partial t} \right\|^2 dt' \right)^{1/2} + \frac{1}{2} \|\xi_h\|^2(0). \end{aligned} \quad (3.2.25)$$

Так как $u_h(x, 0)$ — ортогональная проекция u_0 на H_L , то

$$\|\xi_h(0)\| \leq \|u(0) - v_h(0)\|. \quad (3.2.26)$$

Применим неравенство $|ab| \leq a^2/(4\epsilon) + \epsilon b^2$ к (3.2.25), учитывая ранее доказанную оценку $[u]^2 \geq C\|u\|^2$:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \|\xi_h\|^2(t) + \int_0^t [\xi_h]^2 dt' &\leq \epsilon_1 \int_0^t [\xi_h]^2 dt' + \frac{1}{4\epsilon_1} \int_0^t [u - v_h]^2 dt' + \|u(0) - v_h(0)\|^2 + \\ + \epsilon_2 \|\xi_h(t)\|^2 + \frac{1}{4\epsilon_2} \|u - v_h\|^2(t) &+ c\epsilon_3 \int_0^t [\xi_h]^2 dt' + \frac{1}{4\epsilon_3} \int_0^t \left\| \frac{\partial u}{\partial t} - \frac{\partial v_h}{\partial t} \right\|^2 dt' + \\ &+ \frac{1}{2} \|u(0) - v_h(0)\|^2, \end{aligned}$$

$c = 1/C$. Сгруппируем члены неравенства.

$$\begin{aligned} \left(\frac{1}{2} - \epsilon_2 \right) \|\xi_h\|^2(t) + (1 - \epsilon_1 - c\epsilon_3) \int_0^t [\xi_h]^2 dt' &\leq \frac{1}{4\epsilon_1} \int_0^t [u - v_h]^2 dt' + \\ + \frac{1}{4\epsilon_2} \|u - v_h\|^2(t) + \frac{1}{4\epsilon_3} \int_0^t \left\| \frac{\partial u}{\partial t} - \frac{\partial v_h}{\partial t} \right\|^2 dt' &+ \frac{3}{2} \|u(0) - v_h(0)\|^2. \end{aligned} \quad (3.2.27)$$

Для нашей задачи подходят любые тройки $\epsilon_1, \epsilon_2, \epsilon_3$, которые удовлетворяют следующим условиям:

$$\begin{aligned}\epsilon_2 &< \frac{1}{2}, \epsilon_1 + c\epsilon_3 < 1, \\ \frac{1}{2} - \epsilon_2 &= 1 - \epsilon_1 - c\epsilon_3.\end{aligned}$$

Например, принимая $\epsilon_1 = 3/8, \epsilon_2 = 1/4, \epsilon_3 = 3/8c$, можно переписать (3.2.27):

$$\begin{aligned}\frac{1}{4} \left(\|\xi_h\|^2(t) + \int_0^t [\xi_h]^2 dt' \right) &\leq \|u - v_h\|^2(t) + \\ &+ \frac{2}{3} \int_0^t [u - v_h]^2 dt' + \frac{2c}{3} \int_0^t \left\| \frac{\partial u}{\partial t} - \frac{\partial v_h}{\partial t} \right\|^2 dt' + \frac{3}{2} \|u(0) - v_h(0)\|^2(0),\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\|\xi_h\|^2(t) + \int_0^t [\xi_h]^2 dt' &\leq 4\|u - v_h\|^2(t) + \\ &+ \frac{8}{3} \int_0^t [u - v_h]^2 dt' + \frac{8c}{3} \int_0^t \left\| \frac{\partial u}{\partial t} - \frac{\partial v_h}{\partial t} \right\|^2 dt' + 6\|u(0) - v_h(0)\|^2(0),\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\max_{t \in (0, T)} \|\xi_h\|^2(t) + \int_0^T [\xi_h]^2 dt' &\leq \widehat{c} \left(\max_{t \in (0, T)} \|u - v_h\|^2(t) + \right. \\ &\left. + \int_0^T [u - v_h]^2 dt' + \int_0^T \left\| \frac{\partial u}{\partial t} - \frac{\partial v_h}{\partial t} \right\|^2 dt' + \|u(0) - v_h(0)\|^2 \right). \quad (3.2.28)\end{aligned}$$

Пусть теперь v_h имеет коэффициенты $b_i = u(x_i, t)$. Из (3.2.28), учитывая свойства базисных функций, получаем сходимость u_h к u при $h \rightarrow 0$:

$$\max_{t \in (0, T)} \|u - u_h\|^2(t) + \int_0^T [u - u_h]^2 dt' \rightarrow 0, h \rightarrow 0.$$

Далее докажем справедливость оценки

$$\|u_{(0)} - u_h(0)\| \leq ch^2.$$

Для этого рассмотрим доказанное ранее неравенство (3.1.4):

$$\int_0^1 x^\gamma |f(1) - f(x)|^2 dx \leq \widetilde{C}_\gamma \int_0^1 x^\gamma |Bf(x)|^2 dx.$$

Сделаем замену переменных $\tilde{x} = hx$, $u(\tilde{x}) = f(x)$. Если $x = 1$, то $u(h) = f(1)$ и

$$D_x^{n_1} B_x^{n_2} = h^n D_{\tilde{x}}^{n_1} B_{\tilde{x}}^{n_2},$$

где $n_1 = 0, 1$, $n_1 + 2n_2 \leq 2$.

Для пространства $L_{2,\gamma}$: $n_1 = n_2 = n = 0$ и

$$D_x^0 B_x^0 = h^0 D_{\tilde{x}}^0 B_{\tilde{x}}^0,$$

для $H_{2,\gamma}$:

$$D_x^0 B_x^1 = h^2 D_{\tilde{x}}^0 B_{\tilde{x}}^1.$$

Отсюда получаем:

$$\|u_{(0)} - u_h(0)\|_{L_{2,\gamma}(0,h)} \leq \widetilde{C}_\gamma h^2 \|u_{(0)}\|_{H_{2,\gamma}(0,h)} = c_1 h^2. \quad (3.2.29)$$

Кроме того для $j = 1, \dots, n-1$ было доказано неравенство (3.1.15):

$$\int_{x_j}^{x_{j+1}} x^\gamma |u_h(x) - u(x)|^2 dx \leq 2^{2\gamma+2} h^4 \int_{x_j}^{x_{j+1}} s^\gamma |Bu(s)|^2 ds,$$

из которого следует

$$\|u_{(0)} - u_h(0)\|_{L_{2,\gamma}(x_j, x_{j+1})} \leq c_2 h^2. \quad (3.2.30)$$

Объединяя оценки (3.2.29) и (3.2.30), получаем:

$$\|u_{(0)} - u_h(0)\| \leq ch^2,$$

что и требовалось доказать.

Имеем также оценку

$$\begin{aligned} [u_h(0) - u(0)] &= \left(\int_0^1 x^\gamma \left(p \left(\frac{d(u - u_h)}{dx} \right)^2 (0) + q|u - u_h|^2(0) \right) dx \right)^{\frac{1}{2}} \leq \\ &\leq C \left(\int_0^1 x^\gamma \left(\frac{d(u - u_h)}{dx} \right)^2 dx + \int_0^1 x^\gamma |u - u_h|^2 dx \right)^{\frac{1}{2}} = C \|u_{(0)} - u_h(0)\|_{H_{1,\gamma}}. \end{aligned}$$

В силу оценки (3.1.22) и леммы Сеа имеем:

$$\|u_{(0)} - u_h(0)\|_{H_\gamma^1(0,1)} \leq \|u(x) - \tilde{u}\|_{H_\gamma^1(0,1)} \leq ch \|u\|_{H_\gamma^2(0,1)},$$

где \tilde{u} — интерполянт функции u при $t = 0$, имеем:

$$[u_h(0) - u(0)] \leq ch.$$

Для произвольной функции $v_h = \sum_{i=1}^{n-1} b_i(t)\phi_i(x)$ с непрерывно дифференцируемыми коэффициентами $b_i(t)$ справедливо тождество:

$$\begin{aligned} \int_0^t \left(\frac{\partial}{\partial t}(u - u_h), \frac{\partial}{\partial t}(u - u_h) \right) dt' + \int_0^t \left[u - u_h, \frac{\partial}{\partial t}(u - u_h) \right] dt' = \\ = \int_0^t \left(\frac{\partial}{\partial t}(u - u_h), \frac{\partial}{\partial t}(u - v_h) \right) dt' + \int_0^t \left[u - u_h, \frac{\partial}{\partial t}(u - v_h) \right] dt'. \quad (3.2.31) \end{aligned}$$

Применим интегрирование по частям ко второму слагаемому левой части (3.2.31):

$$\begin{aligned} \int_0^t \left[u - u_h, \frac{\partial}{\partial t}(u - u_h) \right] dt' &= [u - u_h]^2 \Big|_0^t - \int_0^t \left[u - u_h, \frac{\partial}{\partial t}(u - u_h) \right] dt', \\ \int_0^t \left[u - u_h, \frac{\partial}{\partial t}(u - u_h) \right] dt' &= \frac{1}{2} [u - u_h]^2 \Big|_0^t. \end{aligned}$$

Тогда

$$\begin{aligned} & \int_0^t \left(\frac{\partial}{\partial t}(u - u_h), \frac{\partial}{\partial t}(u - u_h) \right) dt' + \frac{1}{2}[u - u_h]^2(t) - \frac{1}{2}[u - u_h]^2(0) = \\ & = \int_0^t \left(\frac{\partial}{\partial t}(u - u_h), \frac{\partial}{\partial t}(u - v_h) \right) dt' + \int_0^t \left[u - u_h, \frac{\partial}{\partial t}(u - v_h) \right] dt'. \quad (3.2.32) \end{aligned}$$

Применим неравенство Коши–Буняковского к равенству (3.2.32):

$$\begin{aligned} & \int_0^t \left\| \frac{\partial \xi_h}{\partial t} \right\|^2 dt' + \frac{1}{2}[\xi_h]^2(t) \leq \frac{1}{2}[u(0) - u_h(0)]^2 + \\ & + \left(\int_0^t \left\| \frac{\partial}{\partial t}(u - u_h) \right\|^2 dt' \right)^{\frac{1}{2}} \left(\int_0^t \left\| \frac{\partial}{\partial t}(u - v_h) \right\|^2 dt' \right)^{\frac{1}{2}} + \\ & + \left(\int_0^t [\xi_h]^2(t) dt' \right)^{\frac{1}{2}} \left(\int_0^t \left[\frac{\partial}{\partial t}(u - v_h) \right]^2 dt' \right)^{\frac{1}{2}}. \end{aligned}$$

Следовательно

$$\begin{aligned} & \int_0^T \left\| \frac{\partial \xi_h}{\partial t} \right\|^2 dt' + \max_{t \in (0, T)} [\xi_h]^2(t) \leq c \left([u(0) - u_h(0)]^2 + \int_0^T \left\| \frac{\partial}{\partial t}(u - v_h) \right\|^2 dt' + \right. \\ & \left. + \left(\int_0^T [\xi_h]^2(t) dt' \right)^{\frac{1}{2}} \left(\int_0^T \left\| \frac{\partial}{\partial t}(u - v_h) \right\|^2 dt' \right)^{\frac{1}{2}} \right). \end{aligned}$$

Принимая $v_h = \sum_{i=0}^{n-1} u(x_i, t) \phi_i(x)$, получим:

$$\left(\int_0^T \left\| \frac{\partial \xi_h}{\partial t} \right\|^2 dt' \right)^{\frac{1}{2}} + \max_{t \in (0, T)} [\xi_h](t) \leq ch.$$

3.3. Непрерывная и дискретная сингулярные модели роста–распространения

Ранее было отмечено, что при описании процессов, включающих диффузию в средах со степенным вырождением или же с симметрией, классический оператор Лапаласа заменяется на оператор Бесселя:

$$B_x = \frac{d^2}{dx^2} + \frac{\gamma}{x} \frac{d}{dx}.$$

Если же при этом приходится учитывать и реакцию, то мы можем, следуя принципу, изложенному в монографии [46] (см. стр. 34), не обращаться к формальному применению «фундаментальных законов к объекту, рассматриваемому как целое». Вместо этого мы можем «просуммировать элементарные акты взаимодействия между его частями, принимая во внимание свойства объекта (например, его геометрию)». В нашем случае по этому принципу мы сложим диффузионную и реакционную составляющие, результатом чего будет следующее сингулярное нелинейное уравнение реакции–диффузии:

$$\frac{\partial u}{\partial t} - x^{-\gamma} \frac{\partial}{\partial x} \left(x^\gamma p(x) \frac{\partial u}{\partial x} \right) = \rho u(1 - u).$$

Рассмотрим непрерывную сингулярную модель реакции–диффузии, состоящую из соотношения (уравнения)

$$\frac{\partial u}{\partial t} - x^{-\gamma} \frac{\partial}{\partial x} \left(x^\gamma p(x) \frac{\partial u}{\partial x} \right) = \rho u(1 - u), \quad x \in \Omega = (0, 1), t \in (0, T], \quad (3.3.1)$$

начального условия

$$u(x, 0) = u_{(0)}, \quad x \in \bar{\Omega} = [0, 1], \quad (3.3.2)$$

и краевых условий

$$\frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{x=0} = 0, \quad u(1, t) = 0, \quad t \in [0, T], \quad (3.3.3)$$

где $u_{(0)} = u_{(0)}(x)$.

Относительно параметра γ будем предполагать: $\gamma > 0, \gamma \neq 1$.

Построение дискретной модели (аппроксимации решения) будет осуществлено двумя методами. Для левой части уравнения разностная схема строится на основе данных, полученных с помощью проекционно–сеточного метода,

рассмотренного в разделе 2 настоящей главы. Указанным методом приближение обобщенного решения задачи найдено в виде $u_h = \sum_{i=1}^{n-1} a_i(t)\phi_i(x)$.

Для аппроксимации нелинейной правой части $u(1-u)$ будем использовать разностную схему с весами, построенную в главе 1. Таким образом, строится разностная схема, позволяющая найти решение начально-краевой задачи (3.3.1)-(3.3.3).

Введем на $[0, 1]$ сетку $0 = x_0 < x_1 < \dots < x_n = 1$, $i = 1, \dots, n$, $h = x_i - x_{i-1}$. В качестве базисных функций $\{\phi_i\}$ выберем финитные функции, определенные по формулам (3.1.17)-(3.1.18).

Коэффициенты a_i , являющиеся функциями от $t \in (0, T)$, находятся из системы ОДУ (3.2.7)-(3.2.8), полученной с помощью метода Бубнова–Галеркина.

Пусть $p(x), q(x)$ — кусочно-постоянные функции с конечным числом разрывов, которые совпадают с узлами сетки. $p_{i-\frac{1}{2}} = p(x), x \in (x_{i-1}, x_i)$, $q_{i-\frac{1}{2}} = q(x), x \in (x_{i-1}, x_i)$.

Введем на $[0, T]$ равномерную сетку $t_j = j\tau, \tau = T/J, j = 0, \dots, J$.

Перепишем уравнения (3.2.7)-(3.2.8) в матричном виде, используя для аппроксимации по времени неявную схему, имеющую первый порядок аппроксимации по τ :

$$\widehat{B}a_0 = a(0), \quad (3.3.4)$$

$$(\widehat{B} + \widehat{A}\tau)a_j = \tau F(t_j) + \widehat{B}a_{j-1}, j = 1, \dots, J, \quad (3.3.5)$$

где $a_j = (a_{1,j}, \dots, a_{n-1,j})^T$.

Поскольку для базисных функций, определенных по формулам (3.1.17)-(3.1.18) скалярное произведение в пространстве $L_{2,\gamma}(\Omega)$ отлично от 0 только для соседних функций, были вычислены ненулевые элементы $A_{j,j-1}, A_{j,j}, A_{j,j+1}$ матрицы A по формулам (3.1.39), (3.1.41), (3.1.44), (3.1.43) и элементы $B_{j,j-1}, B_{j,j}, B_{j,j+1}$ матрицы B по формулам (3.2.11)-(3.2.13).

Для аппроксимации правой части $\rho u(1-u)$ введем произвольные вещественные параметры α, β , такие что $\alpha + \beta = \rho$:

$$\alpha(1 - y_i^j)y_i^{j-1} + \beta(1 - y_i^{j-1})y_i^j, 0 < i < n, 1 \leq j \leq J.$$

Тогда, принимая во внимание, что коэффициенты a_i равны значениям функции в узлах сетки и $\alpha + \beta = \rho$, можно записать разностную схему для

всего уравнения:

$$y_1^j \left[\tau(A_{1,1} - \beta + \rho y_1^{j-1}) + B_{1,1} \right] + y_2^j [\tau A_{1,2} + B_{1,2}] = \\ = y_1^{j-1} [B_{1,1} + \tau\alpha] + y_2^{j-1} B_{1,2}, i = 1,$$

$$y_{i-1}^j [\tau A_{i,i-1} + B_{i,i-1}] + y_i^j \left[\tau(A_{i,i} - \beta + \rho y_i^{j-1}) + B_{i,i} \right] + \\ + y_{i+1}^j [\tau A_{i,i+1} + B_{i,i+1}] = y_{i-1}^{j-1} B_{i,i-1} + y_i^{j-1} [B_{i,i} + \tau\alpha] + y_{i+1}^{j-1} B_{i,i+1}, \overline{2, N-2},$$

$$y_{N-2}^j [\tau A_{N-1,N-2} + B_{N-1,N-2}] + y_{N-1}^j \left[\tau(A_{N-1,N-1} - \beta + \rho y_{N-1}^{j-1}) + \right. \\ \left. + B_{N-1,N-1} \right] = y_{N-2}^{j-1} B_{N-1,N-2} + y_{N-1}^{j-1} [B_{N-1,N-1} + \tau\alpha], i = N - 1.$$

Аппроксимируем начальные и краевые условия:

$$y_1^{j-1} - y_0^{j-1} = 0, y_N^{j-1} = 0,$$

$$y_i^0 = y(x_i, 0) = u_0(x_i).$$

Расширенная матрица этой системы имеет вид

$$\begin{pmatrix} b_1 & c_1 & 0 & 0 & \dots & d_1 \\ a_2 & b_2 & c_2 & \dots & 0 & d_2 \\ & & \dots & & & \\ & & & b_{n-1} & c_{n-1} & d_{N-1} \end{pmatrix},$$

где $a_i = \tau A_{i,i-1} + B_{i,i-1}$, $b_i = \tau(A_{i,i} - \beta + \rho y_i^{j-1}) + B_{i,i}$, $c_i = \tau A_{i,i+1} + B_{i,i+1}$, $d_i = y_{i-1}^{j-1} B_{i,i-1} + y_i^{j-1} [B_{i,i} + \tau\alpha] + y_{i+1}^{j-1} B_{i,i+1}$, $i = \overline{2, N-2}$.

3.4. Конечно–разностная дискретизация двумерных непрерывных сингулярных стационарных моделей

3.4.1. Математическая формализация модели

Рассмотрим в области $\Omega = \{(x_1, x_2) : 0 < x_1 < 1, 0 < x_2 < 1\}$ с границей $\Gamma = \{x_1 = 1, 0 \leq x_2 \leq 1\} \cup \{x_2 = 0, 1, 0 \leq x_1 \leq 1\}$ непрерывную двумерную стационарную сингулярную модель распределения субстанции, состоящую из соотношения:

$$Lu = -f(x_1, x_2), \gamma > 0, (x_1, x_2) \in \Omega, \quad (3.4.1)$$

и краевых условий

$$\begin{aligned} x_1^\gamma \frac{\partial u}{\partial x_1} &= 0, x_1 = 0, \\ u(x) &= 0, x \in \Gamma. \end{aligned} \quad (3.4.2)$$

Оператор L имеет вид

$$Lu = x_1^{-\gamma} \frac{\partial}{\partial x_1} \left(x_1^\gamma \frac{\partial u}{\partial x_1} \right) + \frac{\partial^2 u}{\partial x_2^2} - qu, q \in C(\bar{\Omega}), q \geq 0.$$

3.4.2. Дискретизация непрерывной модели при повышенных условиях гладкости решения

На замыкании области $\Omega = \{(x_1, x_2) : 0 < x_1 < 1, 0 < x_2 < 1\}$ введем сетку $\bar{\omega} = \bar{\omega}_{x_1} \times \bar{\omega}_{x_2}$:

$$\begin{aligned} \bar{\omega}_{x_1} &= \{x_{1,i} = (i - \frac{1}{2})h_1, i = \overline{1, N_1}, (N_1 - \frac{1}{2})h_1 = 1\}, \\ \bar{\omega}_{x_2} &= \{x_{2,j} = jh_2, j = \overline{0, N_2}, h_2 = \frac{1}{N_2}\}. \end{aligned}$$

Множество внутренних узлов сетки $\bar{\omega}$ обозначим ω , а множество узлов, лежащих на границе $\Gamma - \sigma$.

При написании схемы, аппроксимирующей уравнение (3.4.1), будем ис-

пользовать пятиточечный шаблон:

$$(x_{1,i}, x_{2,j}), (x_{1,i-1}, x_{2,j}), (x_{1,i+1}, x_{2,j}), (x_{1,i}, x_{2,j-1}), (x_{1,i}, x_{2,j+1}).$$

На таком шаблоне для всех $i_1 = \overline{2, N_1 - 1}, i_2 = \overline{1, N_2 - 1}$ разностная схема запишется в виде:

$$\begin{aligned} & av(x_{1,i-1}, x_{2,j}) + cv(x_{1,i}, x_{2,j}) + bv(x_{1,i+1}, x_{2,j}) + \\ & + dv(x_{1,i}, x_{2,j-1}) + ev(x_{1,i}, x_{2,j+1}) = -\phi(x_{1,i}, x_{2,j}). \end{aligned} \quad (3.4.3)$$

Для простоты записи будем использовать обозначение $v_{i,j} = v(x_{1,i}, x_{2,j})$.

Вычислим локальную погрешность аппроксимации схемы

$$\begin{aligned} \psi(v) = & av_{i-1,j} + cv_{i,j} + bv_{i+1,j} + dv_{i,j-1} + ev_{i,j+1} + \phi_{ij} - \\ & - \left[\frac{\gamma}{x_{1,i}} v'_{x_1} + v''_{x_1 x_1} + v''_{x_2 x_2} - qv + f \right], \end{aligned}$$

где v, q, f — произвольные достаточно гладкие функции.

Разложим v в точке $(x_{1,i}, x_{2,j})$ по формуле Тейлора.

Формула Тейлора для функции двух переменных имеет вид

$$\begin{aligned} f(x, y) = & f(x_0, y_0) + \sum_{k=1}^n \frac{d^k f(x_0, y_0)}{k!} + R_{n+1} = f(x_0, y_0) + f'_x(x_0, y_0)(x - x_0) + \\ & + f'_y(x_0, y_0)(y - y_0) + \frac{1}{2} f''_{xx}(x - x_0)^2 + f''_{xy}(x - x_0)(y - y_0) + \frac{1}{2} f''_{yy}(y - y_0)^2 + R_3. \end{aligned}$$

Тогда

$$\begin{aligned} v_{i-1,j} &= v_{i,j} - h_1 v'_{x_1} + \frac{h_1^2}{2} v''_{x_1 x_1} - \frac{h_1^3}{6} v'''_{x_1 x_1 x_1} + O(h_1^4), \\ v_{i+1,j} &= v_{i,j} + h_1 v'_{x_1} + \frac{h_1^2}{2} v''_{x_1 x_1} + \frac{h_1^3}{6} v'''_{x_1 x_1 x_1} + O(h_1^4), \\ v_{i,j-1} &= v_{i,j} - h_2 v'_{x_2} + \frac{h_2^2}{2} v''_{x_2 x_2} - \frac{h_2^3}{6} v'''_{x_2 x_2 x_2} + O(h_2^4), \\ v_{i,j+1} &= v_{i,j} + h_2 v'_{x_2} + \frac{h_2^2}{2} v''_{x_2 x_2} + \frac{h_2^3}{6} v'''_{x_2 x_2 x_2} + O(h_2^4). \end{aligned} \quad (3.4.4)$$

Требование $\psi(v) = O(h_1^3 + h_2^3)$ будет осуществлено при выполнении усло-

вий:

$$\begin{aligned}
\phi_{i,j} - f &= 0, \\
a + c + b + d + e + q &= 0, \\
-ah_1 + bh_1 - \frac{\gamma}{x_{1,i}} &= 0, \\
a\frac{h_1^2}{2} + b\frac{h_1^2}{2} - 1 &= 0, \\
-dh_2 + eh_2 &= 0, \\
d\frac{h_2^2}{2} + e\frac{h_2^2}{2} - 1 &= 0.
\end{aligned} \tag{3.4.5}$$

Из уравнений 5-6 системы (3.4.5) имеем

$$e = d = \frac{1}{h_2^2}.$$

Выразим b из уравнения 3:

$$b = \frac{\gamma}{h_1 x_{1,i}} + a,$$

и подставим в 4-ое уравнение, найдем:

$$a = \frac{2x_{1,i} - \gamma h_1}{2h_1^2 x_{1,i}}, b = \frac{2x_{1,i} + \gamma h_1}{2h_1^2 x_{1,i}}.$$

Следовательно

$$c = -a - b - d - e - q = \frac{-2}{h_1^2} + \frac{-2}{h_2^2} - q.$$

С учетом найденных коэффициентов схема (3.4.3) запишется в виде:

$$\begin{aligned}
\frac{2x_{1,i} - \gamma h_1}{2h_1^2 x_{1,i}} v_{i-1,j} - \left(\frac{2}{h_1^2} + \frac{2}{h_2^2} + q \right) v_{i,j} + \frac{2x_{1,i} + \gamma h_1}{2h_1^2 x_{1,i}} v_{i+1,j} + \\
+ \frac{1}{h_2^2} v_{i,j-1} + \frac{1}{h_2^2} v_{i,j+1} = -f_{i,j}.
\end{aligned}$$

Используя пятиточечный шаблон с узлами $(x_{1,1}, x_{2,j})$, $(x_{1,2}, x_{2,j})$, $(x_{1,3}, x_{2,j})$, $(x_{1,1}, x_{2,j+1})$, $(x_{1,1}, x_{2,j-1})$, запишем разностную схему для граничного слоя по переменной x_1 :

$$av_{1,j} + bv_{2,j} + cv_{3,j} + dv_{1,j+1} + ev_{1,j-1} = -\phi_{1,j}, i = 1, \tag{3.4.6}$$

Составим невязку:

$$\psi(v) = av_{1,j} + bv_{2,j} + cv_{3,j} + dv_{1,j+1} + ev_{1,j-1} + \phi_{1,j} - \left[\frac{\gamma}{x_{1,1}} v'_{x_1} + v''_{x_1 x_1} + v''_{x_2 x_2} - qv + f \right].$$

Тогда учитывая (3.4.4), получим:

$$\begin{aligned} v_{2,j} &= v_{1,j} + h_1 v'_{x_1} + \frac{h_1^2}{2} v''_{x_1 x_1} + \frac{h_1^3}{6} v'''_{x_1 x_1 x_1} + O(h_1^4), \\ v_{3,j} &= v_{1,j} + 2h_1 v'_{x_1} + \frac{4h_1^2}{2} v''_{x_1 x_1} + \frac{8h_1^3}{6} v'''_{x_1 x_1 x_1} + O(h_1^4), \\ v_{1,j-1} &= v_{1,j} - h_2 v'_{x_2} + \frac{h_2^2}{2} v''_{x_2 x_2} - \frac{h_2^3}{6} v'''_{x_2 x_2 x_2} + O(h_2^4), \\ v_{1,j+1} &= v_{1,j} + h_2 v'_{x_2} + \frac{h_2^2}{2} v''_{x_2 x_2} + \frac{h_2^3}{6} v'''_{x_2 x_2 x_2} + O(h_2^4). \end{aligned}$$

После группировки коэффициентов, получим систему уравнений:

$$\begin{aligned} \phi_{1,j} - f &= 0, \\ a + c + b + d + e + q &= 0, \\ bh_1 + 2h_1c - \frac{\gamma}{x_{1,1}} &= 0, \\ 2ch_1^2 + b\frac{h_1^2}{2} - 1 &= 0, \\ dh_2 - eh_2 &= 0, \\ d\frac{h_2^2}{2} + e\frac{h_2^2}{2} - 1 &= 0. \end{aligned}$$

Система выше имеет решение

$$\begin{aligned} e = d &= \frac{1}{h_2^2}, \\ c &= \frac{2x_{1,1} - \gamma h_1}{2h_1^2 x_{1,1}}, \quad b = \frac{2\gamma h_1 - 2x_{1,1}}{h_1^2 x_{1,1}}, \\ a &= \frac{2x_{1,1} - 3\gamma h_1}{2h_1^2 x_{1,1}} - \frac{2}{h_2^2} - q. \end{aligned}$$

Таким образом, разностные схемы (3.4.3), (3.4.6) аппроксимируют уравнение (3.4.1) с порядком точности $O(h_1^3 + h_2^3)$ и требуют наличия у функции

производных до четвертого порядка включительно.

3.4.3. Дискретизация непрерывной модели при ослабленных условиях на гладкость решения

Норма в пространствах Киприянова задается следующей формулой:

$$\|u\|_{W_{2,\gamma}^2(\Omega)} = \|u\|_{2,\gamma,\Omega} = \left(\sum_{\substack{0 \leq i_1 + 2i_2 + j \leq 2 \\ i_1 = 0, 1, \\ i_2, j \in \mathbb{Z}_+}} \|D_{x_1}^{i_1} B_{x_1}^{i_2} D_{x_2}^j u(x_1, x_2)\|_{L_{2,\gamma}}^2 \right)^{\frac{1}{2}}, \quad (3.4.7)$$

где

$$\mathbb{Z}_+ = \mathbb{N} \cup \{0\},$$

$$\|u\|_{L_{2,\gamma}(\Omega)} = \|u\|_{0,\gamma,\Omega} = \left(\iint_{\Omega} x_1^\gamma u^2 d\Omega \right)^{\frac{1}{2}}.$$

Через $W_{2,\gamma,0}^2$ обозначим пространство функций, которые получаются замыканием в норме (3.4.7) функций $u(x) \in C^2(\Omega) \cap C(\bar{\Omega})$, удовлетворяющих краевым условиям:

$$\begin{aligned} x_1^\gamma \frac{\partial u}{\partial x_1} &= 0, \quad x_1 = 0, \\ u(x) &= 0, \quad x \in \Gamma. \end{aligned}$$

Определение 3.4.1. Сильным решением задачи (3.4.1)-(3.4.2) будем называть функцию $u \in W_{2,\gamma,0}^2(\Omega)$, которая удовлетворяет интегральному тождеству

$$a(u, \mu) = -l(\mu), \quad \forall \mu \in W_{2,\gamma,0}^2(\Omega), \quad (3.4.8)$$

где

$$\begin{aligned} a(u, \mu) &= \iint_{\Omega} x_1^\gamma L(u) L(\mu) d\Omega, \\ l(\mu) &= \iint_{\Omega} x_1^\gamma f(x_1, x_2) L(\mu) d\Omega, \quad f \in L_{2,\gamma}(\Omega). \end{aligned}$$

Для дальнейшего исследования нам потребуется следующий известный результат [41].

Теорема 3.4.1 (лемма Лакса–Мильграма). Пусть V — гильбертово пространство, билинейная форма $a(\cdot, \cdot) : V \times V \rightarrow \mathbb{R}^1$ — непрерывна и V -эллиптическая, линейная форма $f : V \rightarrow \mathbb{R}^1$ непрерывна.

Тогда задача, состоящая в нахождении элемента $u \in V$ такого, что

$$a(u, v) = \langle f, v \rangle, \forall v \in V,$$

имеет единственное решение.

Доказательство этой теоремы см. [48].

Теорема 3.4.2. Пусть $f(x_1, x_2) \in L_{2,\gamma}(\Omega)$. Тогда сильное решение задачи (3.4.1)-(3.4.2) существует и единственно.

Доказательство. Проверим выполнение условий леммы Лакса–Мильграма.

$$\begin{aligned} a(u, u) &= \iint_{\Omega} x_1^\gamma [L(u)]^2 d\Omega = \iint_{\Omega} x_1^\gamma \left[x_1^{-\gamma} \frac{\partial}{\partial x_1} \left(x_1^\gamma \frac{\partial u}{\partial x_1} \right) + \frac{\partial^2 u}{\partial x_2^2} - qu \right]^2 d\Omega = \\ &= \iint_{\Omega} x_1^\gamma \left[\left(x_1^{-\gamma} \frac{\partial}{\partial x_1} \left(x_1^\gamma \frac{\partial u}{\partial x_1} \right) \right)^2 + \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x_2^2} \right)^2 + (qu)^2 + 2x_1^{-\gamma} \frac{\partial}{\partial x_1} \left(x_1^\gamma \frac{\partial u}{\partial x_1} \right) \frac{\partial^2 u}{\partial x_2^2} - \right. \\ &\quad \left. - 2x_1^{-\gamma} \frac{\partial}{\partial x_1} \left(x_1^\gamma \frac{\partial u}{\partial x_1} \right) qu - 2 \frac{\partial^2 u}{\partial x_2^2} qu \right] d\Omega. \end{aligned} \quad (3.4.9)$$

Далее примем во внимание, что по теореме Вейерштрасса существует конечное значение $Q = \max_{x \in \bar{\Omega}} q(x)$.

Рассмотрим последнее слагаемое равенства (3.4.9):

$$\begin{aligned} -2 \iint_{\Omega} x_1^\gamma \frac{\partial^2 u}{\partial x_2^2} qu d\Omega &\leq -2Q \int_0^1 x_1^\gamma \left[u \frac{\partial u}{\partial x_2} \Big|_{x_2=0}^{x_2=1} - \int_0^1 \frac{\partial u}{\partial x_2} \frac{\partial u}{\partial x_2} dx_2 \right] dx_1 = \\ &= 2Q \iint_{\Omega} x_1^\gamma \left(\frac{\partial u}{\partial x_2} \right)^2 d\Omega. \end{aligned}$$

Предпоследнее:

$$\begin{aligned} -2 \iint_{\Omega} \frac{\partial}{\partial x_1} \left(x_1^\gamma \frac{\partial u}{\partial x_1} \right) q u d\Omega &\leq -2Q \int_0^1 \left[x_1^\gamma \frac{\partial u}{\partial x_1} u \Big|_{x_1=0}^{x_1=1} - \int_0^1 x_1^\gamma \frac{\partial u}{\partial x_1} \frac{\partial u}{\partial x_1} dx_1 \right] dx_2 = \\ &= 2Q \iint_{\Omega} x_1^\gamma \left(\frac{\partial u}{\partial x_1} \right)^2 d\Omega. \end{aligned}$$

Четвертое слагаемое:

$$\begin{aligned} 2 \iint_{\Omega} \frac{\partial}{\partial x_1} \left(x_1^\gamma \frac{\partial u}{\partial x_1} \right) \frac{\partial^2 u}{\partial x_2^2} d\Omega &= 2 \int_0^1 \left[x_1^\gamma \frac{\partial u}{\partial x_1} \frac{\partial^2 u}{\partial x_2^2} \Big|_{x_1=0}^{x_1=1} - \int_0^1 x_1^\gamma \frac{\partial u}{\partial x_1} \frac{\partial^3 u}{\partial x_2^2 \partial x_1} dx_1 \right] dx_2 = \\ &= 2 \int_0^1 x_1^\gamma \frac{\partial u}{\partial x_1} \frac{\partial^2 u}{\partial x_2^2} \Big|_{x_1=0}^{x_1=1} dx_2 - 2 \int_0^1 x_1^\gamma \left(\frac{\partial u}{\partial x_1} \frac{\partial^2 u}{\partial x_2 \partial x_1} \Big|_{x_2=0}^{x_2=1} - \int_0^1 \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x_2 \partial x_1} \right)^2 dx_2 \right) dx_1 = \\ &= 2 \left[x_1^\gamma \frac{\partial u}{\partial x_1} \frac{\partial u}{\partial x_2} \Big|_{x_1=1, x_2=0}^{x_2=1} - \int_0^1 x_1^\gamma \frac{\partial u}{\partial x_1} \frac{\partial^2 u}{\partial x_1 \partial x_2} \Big|_{x_1=1} dx_2 \right] - \\ &\quad - 2 \int_0^1 x_1^\gamma \frac{\partial u}{\partial x_1} \frac{\partial^2 u}{\partial x_2 \partial x_1} \Big|_{x_2=0}^{x_2=1} dx_1 + 2 \iint_{\Omega} x_1^\gamma \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x_2 \partial x_1} \right)^2 d\Omega. \quad (3.4.10) \end{aligned}$$

Для функций $u(x) \in C^2(\Omega) \cap C(\bar{\Omega})$ первые три слагаемых в (3.4.10) равны нулю, поскольку содержат производную по направлению касательной на части границы, где функция равна нулю. Например, при $x_2 = 0, x_2 = 1$ функция $u = 0$, а значит

$$\frac{\partial u}{\partial x_1} = \lim_{\Delta x_1 \rightarrow 0} \frac{u(x_1 + \Delta x_1, x_2) - u(x_1, x_2)}{\Delta x_1} = 0.$$

Аналогично при $x_1 = 1$ производная $\frac{\partial u}{\partial x_2} = 0$.

Тогда перепишем (3.4.10):

$$2 \iint_{\Omega} \frac{\partial}{\partial x_1} \left(x_1^\gamma \frac{\partial u}{\partial x_1} \right) \frac{\partial^2 u}{\partial x_2^2} d\Omega = 2 \iint_{\Omega} x_1^\gamma \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x_2 \partial x_1} \right)^2 d\Omega.$$

Для функций $u \in W_{2,\gamma,0}^2(\Omega)$ это равенство получается переходом к пределу в норме $\|\cdot\|_{2,\gamma,0}$.

Таким образом,

$$a(u, u) \leq \iint_{\Omega} x_1^\gamma \left[\left(x_1^{-\gamma} \frac{\partial}{\partial x_1} \left(x_1^\gamma \frac{\partial u}{\partial x_1} \right) \right)^2 + \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x_2^2} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x_2 \partial x_1} \right)^2 + \right. \\ \left. + Q^2 u^2 + 2Q \left(\frac{\partial u}{\partial x_1} \right)^2 + 2Q \left(\frac{\partial u}{\partial x_2} \right)^2 \right] d\Omega.$$

Сравнивая полученное равенство с полунормой:

$$|u|_{2,\gamma,0}^2 = \iint_{\Omega} x_1^\gamma \left[\left(x_1^{-\gamma} \frac{\partial}{\partial x_1} \left(x_1^\gamma \frac{\partial u}{\partial x_1} \right) \right)^2 + \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x_2^2} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x_2 \partial x_1} \right)^2 \right] d\Omega,$$

получаем, что $a(u, u) \geq |u|_{2,\gamma,0}^2$.

Далее покажем эквивалентность полунормы $|u|_{2,\gamma,0}$ норме $\|u\|_{2,\gamma,0}$. Рассмотрим равенство

$$\frac{\partial u(x_1, x_2)}{\partial x_2} = - \int_{x_1}^1 \frac{\partial^2 u(x_3, x_2)}{\partial x_3 \partial x_2} dx_3.$$

Умножим обе части на $\sqrt{x_1^\gamma}$, возведем в квадрат и проинтегрируем по области Ω :

$$\iint_{\Omega} x_1^\gamma \left(\frac{\partial u(x_1, x_2)}{\partial x_2} \right)^2 d\Omega = \iint_{\Omega} x_1^\gamma \left(\int_{x_1}^1 \frac{\partial^2 u(x_3, x_2)}{\partial x_3 \partial x_2} dx_3 \right)^2 d\Omega \leq \\ \leq \iint_{\Omega} \left(\int_{x_1}^1 \sqrt{x_3^\gamma} \frac{\partial^2 u(x_3, x_2)}{\partial x_3 \partial x_2} dx_3 \right)^2 d\Omega \leq \\ \leq \int_0^1 dx_1 \int_0^1 \left(\int_0^1 x_3^\gamma \left(\frac{\partial^2 u(x_3, x_2)}{\partial x_3 \partial x_2} \right)^2 dx_3 \right) dx_2 \leq \iint_{\Omega} x_1^\gamma \left(\frac{\partial^2 u(x_1, x_2)}{\partial x_1 \partial x_2} \right)^2 d\Omega. \quad (3.4.11)$$

Аналогичным образом проинтегрируем равенство

$$u(x_1, x_2) = \int_0^{x_2} \frac{\partial u(x_1, x_3)}{\partial x_3} dx_3,$$

получим:

$$\begin{aligned} \iint_{\Omega} x_1^\gamma u^2(x_1, x_2) d\Omega &= \iint_{\Omega} x_1^\gamma \left(\int_0^{x_2} \frac{\partial u(x_1, x_3)}{\partial x_3} dx_3 \right)^2 d\Omega \leq \\ &\leq \iint_{\Omega} x_1^\gamma x_2 \int_0^{x_2} \left(\frac{\partial u(x_1, x_3)}{\partial x_3} \right)^2 dx_3 d\Omega \leq \frac{1}{2} \iint_{\Omega} x_1^\gamma \left(\frac{\partial u(x_1, x_2)}{\partial x_2} \right)^2 d\Omega. \end{aligned} \quad (3.4.12)$$

Далее рассмотрим соотношение

$$\frac{\partial u(x_1, x_2)}{\partial x_1} = \int_0^{x_2} \frac{\partial^2 u(x_1, x_3)}{\partial x_1 \partial x_3} dx_3.$$

Для него справедливо:

$$\begin{aligned} \iint_{\Omega} x_1^\gamma \left(\frac{\partial u(x_1, x_2)}{\partial x_1} \right)^2 d\Omega &= \iint_{\Omega} x_1^\gamma \left(\int_0^{x_2} \frac{\partial^2 u(x_1, x_3)}{\partial x_1 \partial x_3} dx_3 \right)^2 d\Omega \leq \\ &\leq \iint_{\Omega} x_1^\gamma \left(\int_0^1 dx_3 \int_0^1 \left(\frac{\partial^2 u(x_1, x_3)}{\partial x_1 \partial x_3} \right)^2 dx_3 \right) d\Omega = \iint_{\Omega} x_1^\gamma \left(\frac{\partial^2 u(x_1, x_2)}{\partial x_1 \partial x_2} \right)^2 d\Omega. \end{aligned} \quad (3.4.13)$$

Учитывая неравенства (3.4.11)-(3.4.13), запишем

$$\begin{aligned} a(u, u) \geq \iint_{\Omega} x_1^\gamma \left[\left(x_1^{-\gamma} \frac{\partial}{\partial x_1} \left(x_1^\gamma \frac{\partial u}{\partial x_1} \right) \right)^2 + \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x_2^2} \right)^2 + \frac{2}{3} \left(\frac{\partial u}{\partial x_2} \right)^2 + \right. \\ \left. + \frac{4}{3} u^2 + \frac{2}{3} \left(\frac{\partial u}{\partial x_1} \right)^2 + \frac{2}{3} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x_2 \partial x_1} \right)^2 \right] d\Omega. \end{aligned}$$

Убеждаемся, что выполняется условие W_2^2 -эллиптичности билинейной формы,

т.е.

$$a(u, u) \geq \chi \|u\|_{2,\gamma,0}, \chi > 0.$$

Проверим выполнение условия $|l(\mu)| \leq M \|\mu\|_{2,\gamma,0}, \forall \mu \in W_{2,\gamma,0}^2(\Omega)$.

$$\begin{aligned} |l(\mu)| &= \left| \iint_{\Omega} x_1^\gamma f(x_1, x_2) \left[x_1^{-\gamma} \frac{\partial}{\partial x_1} \left(x_1^\gamma \frac{\partial \mu}{\partial x_1} \right) + \frac{\partial^2 \mu}{\partial x_2^2} - q\mu \right] d\Omega \right| \leq \\ &\leq \left| \iint_{\Omega} x_1^\gamma x_1^{-\gamma} f(x_1, x_2) \frac{\partial}{\partial x_1} \left(x_1^\gamma \frac{\partial \mu}{\partial x_1} \right) d\Omega \right| + \\ &\quad + \left| \iint_{\Omega} x_1^\gamma f(x_1, x_2) \frac{\partial^2 \mu}{\partial x_2^2} d\Omega \right| + Q \left| \iint_{\Omega} x_1^\gamma f(x_1, x_2) \mu d\Omega \right|. \end{aligned}$$

Для первого слагаемого:

$$\begin{aligned} \left| \iint_{\Omega} x_1^\gamma x_1^{-\gamma} f(x_1, x_2) \frac{\partial}{\partial x_1} \left(x_1^\gamma \frac{\partial \mu}{\partial x_1} \right) d\Omega \right| &\leq \left(\iint_{\Omega} x_1^\gamma f^2(x_1, x_2) d\Omega \right)^{1/2} \times \\ &\times \left(\iint_{\Omega} x_1^\gamma \left(x_1^{-\gamma} \frac{\partial}{\partial x_1} \left(x_1^\gamma \frac{\partial \mu}{\partial x_1} \right) \right)^2 d\Omega \right)^{1/2} \leq \|f\|_{L_{2,\gamma}} \|\mu\|_{2,\gamma,0} = M_1 \|\mu\|_{2,\gamma,0}. \end{aligned}$$

Для второго:

$$\begin{aligned} \left| \iint_{\Omega} x_1^\gamma f(x_1, x_2) \frac{\partial^2 \mu}{\partial x_2^2} d\Omega \right| &\leq \left(\iint_{\Omega} x_1^\gamma f^2(x_1, x_2) d\Omega \right)^{1/2} \times \\ &\times \left(\iint_{\Omega} x_1^\gamma \left(\frac{\partial^2 \mu}{\partial x_2^2} \right)^2 d\Omega \right)^{1/2} \leq M_2 \|\mu\|_{2,\gamma,0}. \end{aligned}$$

Очевидно для третьего слагаемого :

$$Q \left| \iint_{\Omega} x_1^\gamma f(x_1, x_2) \mu d\Omega \right| \leq M_3 \|\mu\|_{2,\gamma,0}.$$

Суммируя полученные оценки для слагаемых, имеем:

$$|l(\mu)| \leq M \|\mu\|_{2,\gamma,0}, \forall \mu \in W_{2,\gamma,0}^2. \quad (3.4.14)$$

Аналогично доказывается третье условие

$$|a(u, \mu)| \leq M \|u\|_{2,\gamma,0} \|\mu\|_{2,\gamma,0}, \forall u, \mu \in W_{2,\gamma,0}^2.$$

$$\begin{aligned} |a(u, \mu)| &= \left| \iint_{\Omega} x_1^\gamma \left[x_1^{-\gamma} \frac{\partial}{\partial x_1} \left(x_1^\gamma \frac{\partial \mu}{\partial x_1} \right) + \frac{\partial^2 \mu}{\partial x_2^2} - q\mu \right] \times \right. \\ &\times \left. \left[x_1^{-\gamma} \frac{\partial}{\partial x_1} \left(x_1^\gamma \frac{\partial u}{\partial x_1} \right) + \frac{\partial^2 u}{\partial x_2^2} - qu \right] d\Omega \right| \leq \\ &\leq \left(\iint_{\Omega} x_1^\gamma \left[x_1^{-\gamma} \frac{\partial}{\partial x_1} \left(x_1^\gamma \frac{\partial \mu}{\partial x_1} \right) + \frac{\partial^2 \mu}{\partial x_2^2} - q\mu \right]^2 d\Omega \right)^{1/2} \times \\ &\times \left(\iint_{\Omega} x_1^\gamma \left[x_1^{-\gamma} \frac{\partial}{\partial x_1} \left(x_1^\gamma \frac{\partial u}{\partial x_1} \right) + \frac{\partial^2 u}{\partial x_2^2} - qu \right]^2 d\Omega \right)^{1/2}. \end{aligned}$$

Используя уже доказанную оценку (3.4.14), имеем:

$$|a(u, \mu)| \leq M \|u\|_{2,\gamma,0} \|\mu\|_{2,\gamma,0}, \forall u, \mu \in W_{2,\gamma,0}^2.$$

□

Скалярное произведение и норма на множестве сеточных функций, обращающихся в нуль на границе, задаются следующим образом:

$$(y, v) = \sum_{x \in \omega} y(x)v(x)h_1h_2,$$

$$\|y\| = (y, y)^{1/2}.$$

Следуя обозначениям [41], запишем разностные отношения по формулам:

$$\begin{aligned} y^{(\pm 1_i)} &= y^{(\pm 1_i)}(x) = y(x_1, \dots, x_i \pm h_i, \dots, x_n), \\ y_{\bar{x}_i} &= y_{\bar{x}_i}(x) = \frac{y - y^{(-1_i)}}{h_i}, \\ y_{x_i} &= y_{x_i}(x) = \frac{y^{(+1_i)} - y}{h_i}, \\ y_{\bar{x}_i x_i} &= y_{\bar{x}_i x_i}(x) = \frac{y^{(+1_i)} - 2y + y^{(-1_i)}}{h_i^2}, \quad i = \overline{1, n}. \end{aligned}$$

Примем функцию $\mu(x)$ из равенства (3.4.8) такой, чтобы она удовлетворяла равенству

$$x_1^{-\gamma} \frac{\partial}{\partial x_1} \left(x_1^\gamma \frac{\partial \mu}{\partial x_1} \right) + \frac{\partial^2 \mu}{\partial x_2^2} - q\mu = \begin{cases} 1, & (x_1, x_2) \in e, \\ 0, & (x_1, x_2) \in \Omega \setminus e. \end{cases}$$

$$e = \{(\xi_1, \xi_2), |\xi_1 - x_1| < \frac{h_1}{2}, |\xi_2 - x_2| < \frac{h_2}{2}\}.$$

С учетом выбранного μ запишем (3.4.8):

$$\frac{1}{h_1 h_2} \iint_e \left[\frac{\partial}{\partial x_1} \left(x_1^\gamma \frac{\partial u}{\partial x_1} \right) + x_1^\gamma \frac{\partial^2 u}{\partial x_2^2} - x_1^\gamma q u \right] dx_1 dx_2 = -\frac{1}{h_1 h_2} \iint_e f(x_1, x_2) x_1^\gamma dx_1 dx_2.$$

Рассмотрим первое слагаемое левой части полученного выражения:

$$\frac{1}{h_1 h_2} \iint_e \frac{\partial}{\partial x_1} \left(x_1^\gamma \frac{\partial u}{\partial x_1} \right) dx_1 dx_2 = \frac{1}{h_1 h_2} \int_{x_2 - \frac{h_2}{2}}^{x_2 + \frac{h_2}{2}} \xi^\gamma \frac{\partial u(\xi, \tau)}{\partial \xi} \Big|_{x - \frac{h_1}{2}}^{x + \frac{h_1}{2}} d\tau,$$

$$\left(x_1^\gamma \frac{\partial u}{\partial x_1} \right)^{-0,5_1} = \left(x_1 - \frac{h_1}{2} \right)^\gamma \frac{\partial u(x - \frac{h_1}{2}, x_2)}{\partial x_1},$$

$$S_2 \left(x_1^\gamma \frac{\partial u}{\partial x} \right)^{-0,5_1} = \frac{1}{h_2} \int_{x_2 - \frac{h_2}{2}}^{x_2 + \frac{h_2}{2}} \left(x_1 - \frac{h_1}{2} \right)^\gamma \frac{\partial u(x - \frac{h_1}{2}, \tau)}{\partial x_1} d\tau,$$

$$\left[S_2 \left(x_1^\gamma \frac{\partial u}{\partial x_1} \right)^{-0,5_1} \right]_{x_1} = \frac{1}{h_1 h_2} \int_{x_2 - \frac{h_2}{2}}^{x_2 + \frac{h_2}{2}} \left[\left(x_1 + \frac{h_1}{2} \right)^\gamma \frac{\partial u(x_1 + \frac{h_1}{2}, \tau)}{\partial x_1} - \left(x_1 - \frac{h_1}{2} \right)^\gamma \frac{\partial u(x_1 - \frac{h_1}{2}, \tau)}{\partial x_1} \right] d\tau,$$

Второе слагаемое:

$$\frac{1}{h_1 h_2} \iint_e x_1^\gamma \frac{\partial^2 u}{\partial x_2^2} dx_1 dx_2 = \frac{1}{h_1 h_2} \int_{x_1 - \frac{h_1}{2}}^{x_1 + \frac{h_1}{2}} \xi^\gamma \frac{\partial u(\xi, \tau)}{\partial \tau} \Big|_{x_2 - \frac{h_2}{2}}^{x_2 + \frac{h_2}{2}} d\xi,$$

$$\left(x_1^\gamma \frac{\partial u(x_1, x_2)}{\partial x_2} \right)^{-0,5_2} = x_1^\gamma \frac{\partial u \left(x_1, x_2 - \frac{1}{h_2} \right)}{\partial x_2},$$

$$S_1 \left(x_1^\gamma \frac{\partial u(x_1, x_2)}{\partial x_2} \right)^{-0,5_2} = \frac{1}{h_1} \int_{x_1 - \frac{h_1}{2}}^{x_1 + \frac{h_1}{2}} \xi^\gamma \frac{\partial u \left(\xi, x_2 - \frac{1}{h_2} \right)}{\partial x_2} d\xi,$$

$$\left[S_1 \left(x_1^\gamma \frac{\partial u(x_1, x_2)}{\partial x_2} \right)^{-0,5_2} \right]_{x_2} = \frac{1}{h_1 h_2} \int_{x_1 - \frac{h_1}{2}}^{x_1 + \frac{h_1}{2}} \left[\xi^\gamma \frac{\partial u \left(\xi, x_2 + \frac{1}{h_2} \right)}{\partial x_2} - \xi^\gamma \frac{\partial u \left(\xi, x_2 - \frac{1}{h_2} \right)}{\partial x_2} \right] d\xi.$$

Третье слагаемое:

$$-q S_1 S_2 (x_1^\gamma u(x_1, x_2)) = -\frac{q}{h_1 h_2} \iint_e \xi^\gamma u(\xi, \tau) d\xi d\tau.$$

Тогда рассматриваемое равенство (3.4.8) запишется в виде:

$$\left[S_2 \left(x_1^\gamma \frac{\partial u}{\partial x_1} \right)^{-0,5_1} \right]_{x_1} + \left[S_1 \left(x_1^\gamma \frac{\partial u}{\partial x_2} \right)^{-0,5_2} \right]_{x_2} - q S_1 S_2 (x_1^\gamma u) = -S_1 S_2 (x_1^\gamma f),$$

где S_1 и S_2 — усредняющие операторы Стеклова по переменным x_1 и x_2 соответственно, определенные по формуле

$$S_i u(x) = \frac{1}{h_i} \int_{x_i-0,5h_i}^{x_i+0,5h_i} u(x_1, \dots, \xi_i, \dots, x_n) d\xi_i.$$

Далее в последнем интегральном тождестве заменим производные конечно-разностными соотношениями, интегралы — квадратурной формулой прямоугольников.

По первой переменной произведем аппроксимацию производной центрально-разностным соотношением

$$\begin{aligned} S_2 \left(x_1^\gamma \frac{\partial u}{\partial x_1} \right)^{-0,5_1} &\cong S_2 \left(x_1^\gamma \frac{u(x_1 + 0,5h_1, \xi_2) - u(x_1 - 0,5h_1, \xi_2)}{h_1} \right)^{-0,5_1} = \\ &= \frac{1}{h_2} \int_{x_2-0,5h_2}^{x_2+0,5h_2} (x_1 - 0,5h_1)^\gamma \frac{u(x_1, \xi_2) - u(x_1 - h_1, \xi_2)}{h_1} d\xi_2 \cong (x_1 - 0,5h_1)^\gamma y_{\bar{x}_1}. \end{aligned}$$

Аналогичные действия произведем по второй переменной

$$\begin{aligned} S_1 \left(x_1^\gamma \frac{\partial u}{\partial x_2} \right)^{-0,5_2} &\cong S_1 \left(\xi_1^\gamma \frac{u(\xi_1, x_2 + 0,5h_2) - u(\xi_1, x_2 - 0,5h_2)}{h_2} \right)^{-0,5_2} = \\ &= \frac{1}{h_1} \int_{x_1-0,5h_1}^{x_1+0,5h_1} \xi_1^\gamma \frac{u(\xi_1, x_2) - u(\xi_1, x_2 - h_2)}{h_2} d\xi_1 \cong x_1^\gamma y_{\bar{x}_2}. \end{aligned}$$

Запишем разностную схему для приближенного решения $y(x_1, x_2)$:

$$\begin{aligned} \Lambda y &\equiv ((x_1 - 0,5h_1)^\gamma y_{\bar{x}_1})_{x_1} + x_1^\gamma y_{\bar{x}_2 x_2} - q x_1^\gamma y = \\ &= -S_1 S_2 (x_1^\gamma f(x_1, x_2)), (x_1, x_2) \in \omega, \\ &y(x_1, x_2) = 0, (x_1, x_2) \in \sigma. \end{aligned} \tag{3.4.15}$$

Обозначим погрешность v , тогда $\Lambda v = \Lambda y - \Lambda u$, где y — решение задачи (3.4.15), u — решение задачи (3.4.1)-(3.4.2):

$$\begin{aligned} \Lambda v &= S_1 S_2 (x_1^\gamma f(x_1, x_2)) - \Lambda u = \psi(x_1, x_2), (x_1, x_2) \in \omega, \\ v(x_1, x_2) &= 0, (x_1, x_2) \in \sigma. \end{aligned} \quad (3.4.16)$$

Представим погрешность аппроксимации ψ в дивергентном виде:

$$\psi(x_1, x_2) = -\eta_{1x_1} - \eta_{2x_2} + \eta_3,$$

$$\eta_1 = (x_1 - 0, 5h_1)^\gamma u_{\bar{x}_1} - S_2 \left(x_1^\gamma \frac{\partial u}{\partial x_1} \right)^{-0,5_1}, \quad (3.4.17)$$

$$\eta_2 = x_1^\gamma u_{\bar{x}_2} - S_1 \left(x_1^\gamma \frac{\partial u}{\partial x_2} \right)^{-0,5_2}, \quad (3.4.18)$$

$$\eta_3 = -x_1^\gamma q u + q S_1 S_2 (x_1^\gamma u). \quad (3.4.19)$$

Применим скалярное умножение на v к (3.4.16), а затем используем первую формулу Грина с учетом равенства функции нулю в граничных точках:

$$(v_{\bar{x}_i x_i}, v) = -(v_{\bar{x}_i}, v_{\bar{x}_i}]_i = -\|v_{\bar{x}_i}\|_i^2,$$

где

$$(\omega, v]_1 = \sum_{i_1=1}^{N_1} \sum_{i_2=1}^{N_2-1} \omega(i_1 h_1, i_2 h_2) v(i_1 h_1, i_2 h_2) h_1 h_2,$$

$$(\omega, v]_2 = \sum_{i_1=1}^{N_1-1} \sum_{i_2=1}^{N_2} \omega(i_1 h_1, i_2 h_2) v(i_1 h_1, i_2 h_2) h_1 h_2,$$

получим:

$$\begin{aligned} &(((x_1 - 0, 5h_1)^\gamma v_{\bar{x}_1})_{x_1}, v) + (x_1^\gamma v_{\bar{x}_2 x_2}, v) - (x_1^\gamma q v, v) = \\ &= -((x_1 - 0, 5h_1)^\gamma v_{\bar{x}_1}, v_{\bar{x}_1}]_1 - (x_1^\gamma v_{\bar{x}_2}, v_{\bar{x}_2}]_2 - (x_1^\gamma q v, v) = \\ &= (\psi, v) = (\eta_1, v_{\bar{x}_1}]_1 + (\eta_2, v_{\bar{x}_2}]_2 + (\eta_3, v). \end{aligned}$$

Введем в рассмотрение следующую норму:

$$\|\Xi y\|_{0,\gamma,\omega} = \{((x_1 - 0, 5h_1)^\gamma y_{\bar{x}_1}, y_{\bar{x}_1}]_1 + (x_1^\gamma y_{\bar{x}_2}, y_{\bar{x}_2}]_2 + (x_1^\gamma q y, y)\}^{\frac{1}{2}}.$$

С учетом неравенства Коши–Буняковского:

$$\begin{aligned} \|\Xi v\|_{0,\gamma,\omega}^2 \leq & \left\| \left[\frac{1}{\sqrt{(x_1 - 0,5h_1)^\gamma} \eta_1} \right] \right\|_1 \left\| \left[\sqrt{(x_1 - 0,5h_1)^\gamma} v_{\bar{x}_1} \right] \right\|_1 + \\ & + \left\| \left[\frac{1}{\sqrt{x_1^\gamma} \eta_2} \right] \right\|_2 \left\| \left[\sqrt{x_1^\gamma} v_{\bar{x}_2} \right] \right\|_2 + \|\eta_3\| \|v\|. \end{aligned} \quad (3.4.20)$$

Оценим множители, входящие в правую часть (3.4.20):

$$\left\| \left[\sqrt{(x_1 - 0,5h_1)^\gamma} v_{\bar{x}_1} \right] \right\|_1 = \sqrt{((x_1 - 0,5h_1)^\gamma v_{\bar{x}_1}, v_{\bar{x}_1})_1} \leq \|\Xi v\|_{0,\gamma,\omega},$$

$$\left\| \left[\sqrt{x_1^\gamma} v_{\bar{x}_2} \right] \right\|_2 = \sqrt{(x_1^\gamma v_{\bar{x}_2}, v_{\bar{x}_2})_2} \leq \|\Xi v\|_{0,\gamma,\omega}.$$

Для оценки $\|v\|$ рассмотрим равенство:

$$v_{\bar{\xi}_2} = \frac{v(x_1, \xi_2) - v(x_1, \xi_2 - h_2)}{h_2},$$

$$\begin{aligned} \sum_{\xi_2=h_2}^{x_2} h_2 v_{\bar{\xi}_2}(x_1, \xi_2) &= v(x_1, h_2) - v(x_1, 0) + v(x_1, 2h_2) - v(x_1, h_2) + v(x_1, 3h_2) - \\ &- v(x_1, 2h_2) + \dots + v(x_1, x_2 - h_2) - v(x_1, x_2 - 2h_2) + v(x_1, x_2) - v(x_1, x_2 - h_2) = \\ &= v(x_1, x_2). \end{aligned}$$

Умножим равенство

$$v(x_1, x_2) = \sum_{\xi_2=h_2}^{x_2} h_2 v_{\bar{\xi}_2}(x_1, \xi_2)$$

на $\sqrt{x_1^\gamma h_1 h_2}$, возведем в квадрат и просуммируем по сетке ω :

$$h_1 h_2 \sum_{\omega} x_1^\gamma v^2(x_1, x_2) = \|v\|_{0,\gamma,\omega}^2 = \sum_{\omega} x_1^\gamma h_1 h_2 h_2^2 \left(\sum_{\xi_2=h_2}^{x_2} v_{\bar{\xi}_2}(x_1, \xi_2) \right)^2. \quad (3.4.21)$$

Принимая во внимание следующее неравенство

$$(a_1 + a_2 + \dots + a_n)^2 \leq n (a_1^2 + a_2^2 + \dots + a_n^2),$$

перепишем (3.4.21):

$$\begin{aligned}
\|v\|_{0,\gamma,\omega}^2 &\leq \sum_{\omega} x_1^\gamma h_2^2 N_2 \sum_{\omega_2} v_{\xi_2}^2(x_1, \xi_2) h_1 h_2 = \left| h_2 N_2 = 1 \right| = \\
&= \sum_{\omega} x_1^\gamma h_1 h_2^2 \sum_{\xi_2 \in \omega_2} v_{\xi_2}^2(x_1, \xi_2) = \sum_{x_1 \in \omega_1} x_1^\gamma h_1 \sum_{x_2 \in \omega_2} h_2 \sum_{\xi_2 \in \omega_2} v_{\xi_2}^2(x_1, \xi_2) h_2 \leq \\
&\leq 2 \sum_{x_1 \in \omega_1} x_1^\gamma h_1 \sum_{\xi_2 \in \omega_2} v_{\xi_2}^2(x_1, \xi_2) h_2 = 2 \left\| \sqrt{x_1^\gamma} v_{\xi_2} \right\|^2 \leq C \|\Xi v\|^2.
\end{aligned}$$

Следовательно, доказана следующая теорема.

Теорема 3.4.3. Разностная схема (3.4.15) имеет единственное решение, являющееся устойчивым по правой части. Выполнена априорная оценка:

$$\|\Xi v\|_{0,\gamma,\omega} \leq \left\| \frac{1}{\sqrt{(x_1 - 0,5h_1)^\gamma}} \eta_1 \right\|_1 + \left\| \frac{1}{\sqrt{x_1^\gamma}} \eta_2 \right\|_2 + \|\eta_3\| C,$$

где η_1, η_2, η_3 определены по формулам (3.4.17)-(3.4.19).

3.5. Выводы

1. Для сингулярной диффузионной модели с оператором Бесселя разработан эффективный численный метод дискретизации, включающий проекционно-сеточный метод Бубнова-Галеркина с использованием финитных сплайнов особого типа. Доказана оценка сходимости в пространстве $H_\gamma^1((0, 1) \times (0, T))$.

2. Для сингулярной нелинейной модели роста-распространения построена разностная схема. Построение осуществлено с использованием проекционно-сеточного метода, а также линеаризующей разностной схемы. Приведена расширенная матрица системы линейных алгебраических уравнений.

3. Разработана аппроксимирующая дискретная модель для плоской сингулярной стационарной задачи распределения субстанции, которая отличается учетом ослабленных требований к гладкости решения. Получена априорная оценка.

Глава 4.

Комплекс программ

Требования к аппаратному и программному обеспечению

Программное обеспечение: кроссплатформенная интегрированная среда разработки для языка программирования Python PyCharm версии 5.0 и выше.

Операционная система: Windows 8, 10 или 11 (64-битные версии), macOS 10.14 или более поздняя версия, Linux со средой GNOME, KDE или Unity DE. Если дистрибутив не включает Glibc 2.14 или более позднюю версию (например, RHEL 6 или CentOS 6), то PyCharm может быть для него недоступен.

4.1. Интерфейс пользователя

4.1.1. Интерфейс пользователя для реализации регулярной модели роста–распространения

В начале работы с приложением открывается форма для заполнения входных данных для моделирования (Рис. 4.1).

Рис. 4.1: Стартовая форма для заполнения входных данных

Пользователю предлагается ввести в форму исходные данные, после чего можно воспользоваться кнопками «Провести моделирование» и «Погрешность моделирования» (для задач с известным точным решением). Слева от полей для ввода указаны требуемые диапазоны ввода данных. В том случае, если введенные данные не соответствуют установленным требованиям (Рис. 4.2), при нажатии на любую из двух кнопок на экран выводится сообщение о некорректности введенных данных (Рис. 4.3). Ввод данных в графы «Начальное условие», «Левое граничное условие», «Правое граничное условие» осуществляется в соответствии с правилами синтаксиса языка Python. Например, если требуется ввести функцию $\sin \sqrt{6}$, в поле должна быть введена запись `sin(sqrt(6))`.

Если пользователь не заполнил одно или несколько полей или допустил ошибку при написании формулы, на экране появляется сообщение об ошибке (Рис. 4.4).

При условии корректности введенных данных после нажатия на кнопку «Провести моделирование» на экране появится графическое поле, которое содержит графики, отображающие смоделированный рост и распространение в заданные моменты времени.

Рис. 4.2: Пример некорректного заполнения стартовой формы

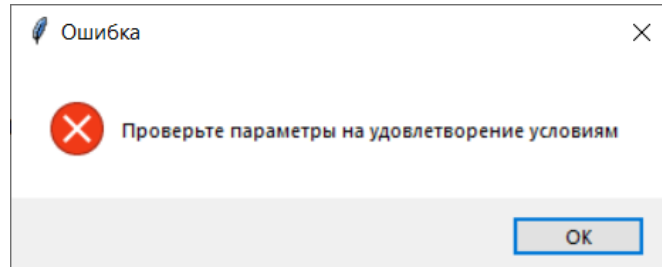


Рис. 4.3: Сообщение о некорректно заполненных входных данных (параметр beta)

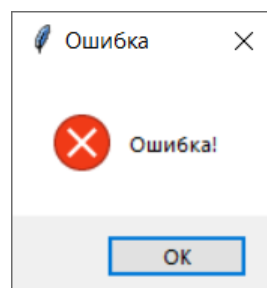


Рис. 4.4: Сообщение об ошибке

Для задач, имеющих точное решение, строятся графики сеточной функции в моменты времени $t_1 = T/4$, $t_2 = T/2$, $t_3 = T$ и графики функции точного

решения в те же моменты времени (Рис. 4.5). Кнопка «Погрешность моделирования» выводит на экран два окна. Первое окно содержит таблицу с абсолютными ошибками вычислений (Рис. 4.6), вторая форма — с относительными ошибками, выраженными в процентах (Рис. 4.7).

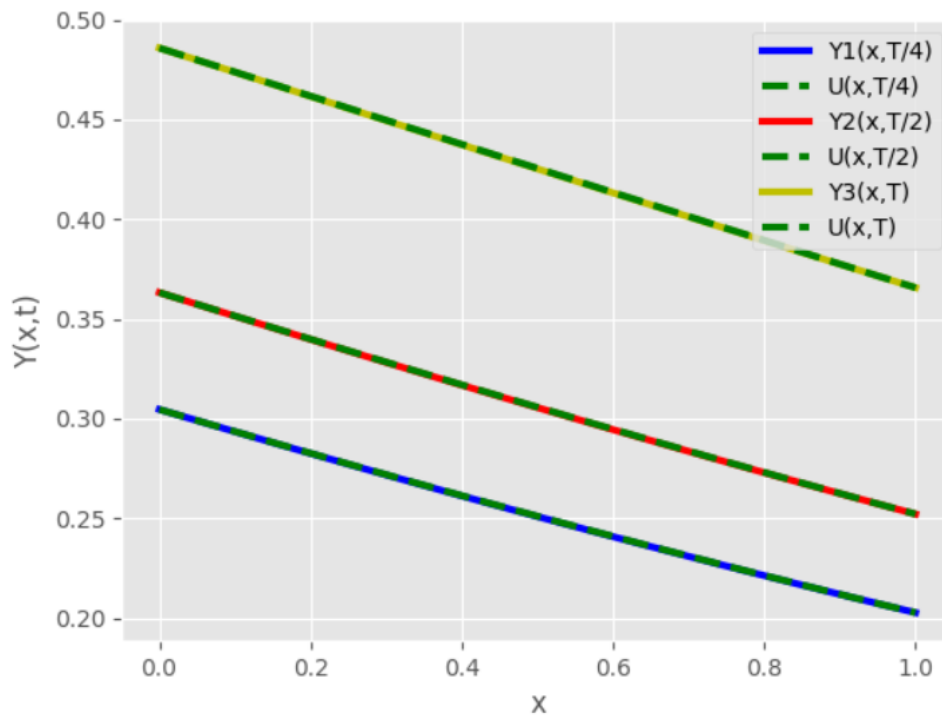


Рис. 4.5: Окно с графиками функций

x_j	t_1	t_2	t_3
0.0	0.0	0.0	0.0
0.1	6.815073044857956e-05	8.008465592840297e-05	8.635197712381082e-05
0.2	0.00011961304365820657	0.00014178010687726506	0.00015367635373320088
0.3	0.00015518276097542527	0.0001852941501303551	0.00020186273528055576
0.4	0.0001755876060343367	0.00021083878243094434	0.00023081771657601502
0.5	0.00018130954305300984	0.00021863262249738336	0.000240474449480829597
0.6	0.00017285114911683164	0.0002089043196415452	0.0002308024201799208
0.7	0.00015043973289721735	0.00018189730869860865	0.00020181642459626836
0.8	0.00011418309166461027	0.00013787601148501638	0.00015358625987349495
0.9	6.406789547186431e-05	7.713345157256413e-05	8.624546824909096e-05
1.0	0.0	0.0	0.0

Рис. 4.6: Форма, содержащая абсолютные ошибки вычисления

x_j	t_1	t_2	t_3
0.0	0.0	0.0	0.0
0.1	0.014382256243043715	0.022784034819784485	0.029418950857588857
0.2	0.025902490316189932	0.04171657064793997	0.05437388008305159
0.3	0.03450866477937441	0.056431151076146095	0.07423834009633497
0.4	0.04011886699270467	0.06651594571330222	0.08830621737661115
0.5	0.04261008713973126	0.07150961614592434	0.09578619215223322
0.6	0.041807860980635346	0.07089717757839703	0.09579611081827415
0.7	0.037477830533818104	0.06410605850513289	0.08735734458592866
0.8	0.02932081017016781	0.05050252955315507	0.06938922279258897
0.9	0.016971355262149986	0.02938867170578534	0.040703645743772277
1.0	0.0	0.0	0.0

Рис. 4.7: Форма, содержащая относительные ошибки вычисления, %

4.1.2. Интерфейс пользователя для сингулярной модели роста–распространения

Работа программы, предназначенной для моделирования сингулярного процесса роста и распространения, начинается с появления формы для ввода исходных данных Рис. 4.8.

Сингулярная модель роста и распространения

Введите данные для моделирования:

Скорость миграции D : Скорость роста ρ :

$\gamma > 0$:

Введите границы интервалов изменения переменных:

$T > 0$: x_0 : x_1 :

Введите сеточные параметры:

$N > 0$: $M > 0$: $\beta > 0$:

Рис. 4.8: Стартовая форма для заполнения входных данных

Для случая некорректного заполнения формы предусмотрен вывод информационных сообщений (Рис. 4.3, 4.4).

При нажатии на кнопку «Провести моделирование» появится графическое поле, которое содержит графики, отображающие смоделированный рост и распространение в заданные моменты времени.

4.2. Реализация на языке Python

4.2.1. Реализация на языке Python для регулярной модели роста–распространения

Представляется пользовательская программа на языке Python, которая моделирует рост и распространение с помощью метода конечных разностей и отображает результаты в графическом виде.

Алгоритм симуляции регулярной модели роста–распространения и ее графического отображения:

1. Импорт необходимых модулей: `math`, `tkinter` и `matplotlib`.
2. Создание главного окна `Tkinter`, размещение элементов графического интерфейса (метки, поля ввода и кнопки) с помощью метода `place()`.
3. Запуск цикла обработки событий `Tkinter` и отображения графического интерфейса с помощью функции `mainloop()`.
4. Вызов функций `open_error()` и `format_error()` для отображения сообщений об ошибках с помощью `tkinter.messagebox`.
5. Обработка нажатия кнопки «Провести моделирование» с помощью функции `data1()`.
6. Обработка нажатия кнопки «Погрешность моделирования» с помощью функция `data2()`.
7. Вызов методов класса `TableFunction`, который инкапсулирует функциональность для дискретизации регулярной модели роста и распространения с помощью метода конечных разностей.
8. Расчет с помощью функции $U(x, t)$ точного решения для регулярной модели реакции–диффузии.
9. Создание окна `Tkinter` и отображения таблиц ошибок с помощью виджета `ttk.Treeview` с помощью класса `Windows`.

Функция `data2()` реализует алгоритм:

1. Извлекает входные значения из графического интерфейса пользователя.
2. Проверяет входные значения. Обрабатывает любые возможные исключения и выводит сообщения об ошибках с помощью функций `open_error()` и `format_error()`.
3. Создает объект `TableFunction` и вызывает его методы `Initialization()`, `Progonka()`, и `Fallacy()` для решения уравнения и вычисления абсолютной и относительной ошибок.
4. Создает `Windows`-объект для отображения таблиц ошибок в окне `Tkinter`.

Функция `data1()` выполняет следующий алгоритм:

1. Извлекает входные значения из графического интерфейса пользователя.

2. Проверяет входные значения. Обрабатывает любые возможные исключения и выводит сообщения об ошибках с помощью функций `open_error()` и `format_error()`.

3. Создает объект `TableFunction` и вызывает его методы `Initialization()`, `Progonka()`, и `Graph()` для отображения результатов моделирования.

Класс `TableFunction` имеет следующие методы:

`__init__()`: Инициализирует класс с заданными параметрами $Y, x_0, N, M, l, T, D, rho$.

`Initialization()`: Инициализирует значения сеточной функции Y в соответствии с заданными начальным и граничными условиями.

`PrintMatr()`: Выводит значения массива в табличном формате.

`Progonka()`: Реализует алгоритм прогонки (трехдиагональной матрицы) для решения разностных уравнений.

`Graph()`: Отображает результаты моделирования в различные моменты времени.

`Fallacy()`: Вычисляет абсолютную и относительную погрешности между численным решением и точным решением.

4.2.2. Реализация на языке Python для сингулярной модели роста–распространения

Основная цель разработанной программы — предоставить удобный интерфейс для моделирования роста и распространения в случае сингулярной модели.

Алгоритм симуляции сингулярной модели роста–распространения и ее графического отображения:

1. Импорт необходимых модулей: `math`, `tkinter` и `matplotlib`.
2. Создание главного окна `Tkinter`, размещение элементов графического интерфейса (метки, поля ввода и кнопки) с помощью метода `place()`.
3. Запуск цикла обработки событий `Tkinter` и отображения графического интерфейса с помощью функции `mainloop()`.
4. Вызов функций `open_error()` и `format_error()` для отображения сообщений об ошибках с помощью `tkinter.messagebox`.
5. Обработка нажатия кнопки «Провести моделирование» с помощью

функции `data1()`.

6. Вызов методов класса `TableFunction`, который инкапсулирует функциональность для дискретизации сингулярной нелинейной модели реакции–диффузии с помощью метода конечных разностей.

7. Создание окна Tkinter и отображения таблиц ошибок с помощью виджета `ttk.Treeview` с помощью класса `Windows`.

Функция `data1()` выполняет следующий алгоритм:

1. Извлекает входные значения из графического интерфейса пользователя.

2. Проверяет входные значения. Обрабатывает любые возможные исключения и выводит сообщения об ошибках с помощью функций `open_error()` и `format_error()`.

3. Создает объект `TableFunction` и вызывает его методы `Initialization()`, `Progonka()`, и `Graph()` для отображения результатов моделирования.

Класс `TableFunction` имеет следующие методы:

`__init__()`: Инициализирует класс с заданными параметрами $Y, D, rho, x_0, x_n, N, M, T, gamma$.

`Initialization()`: инициализирует массив Y нулями, вычисляет значения начальных условий и сохраняет их в $Y[i][0]$.

`PrintMatr()`: Выводит значения двумерного массива в табличном формате.

`Progonka()`: Реализует метод прогонки для решения системы уравнений. Вычисляет коэффициенты для трёхдиагональной матрицы, выполняет прямую и обратную подстановку и обновляет значения Y на основе вычисленного решения.

`Graph()`: Извлекает значения Y в определенные моменты времени и отображает результаты моделирования в графическом виде.

4.3. Диаграммы классов и сценариев

На Рисунках 4.9, 4.10 представлены диаграммы классов для программ, реализующих дискретизацию регулярной и сингулярной моделей роста–распространения соответственно. Рисунки 4.11, 4.12 отображают диаграммы сценариев для указанных программ.

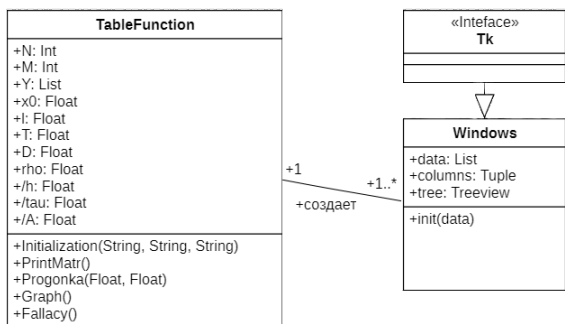


Рис. 4.9: Диаграмма классов для программы, реализующей дискретизацию регулярной модели роста-распространения

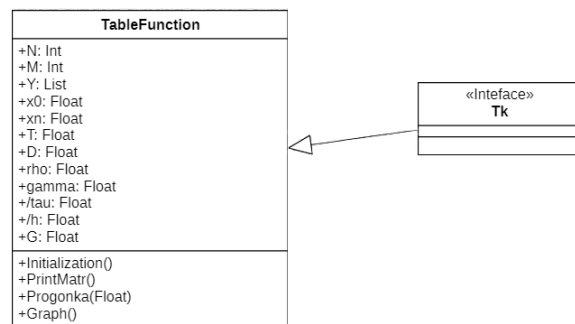


Рис. 4.10: Диаграмма классов для программы, реализующей дискретизацию сингулярной модели роста-распространения

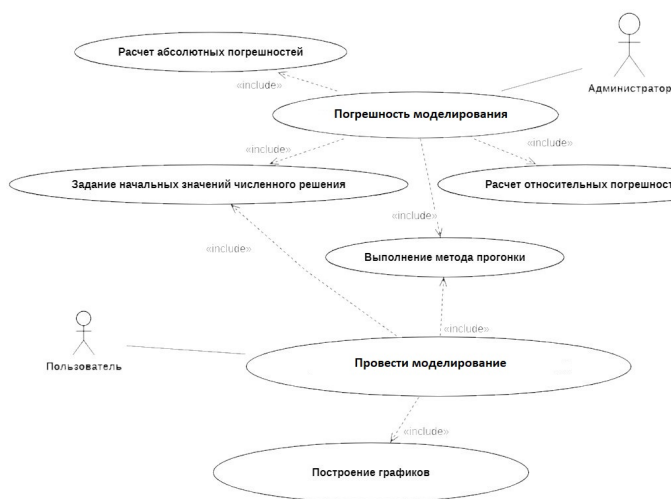


Рис. 4.11: Диграмма сценариев для программы, реализующей регулярную модель роста-распространения

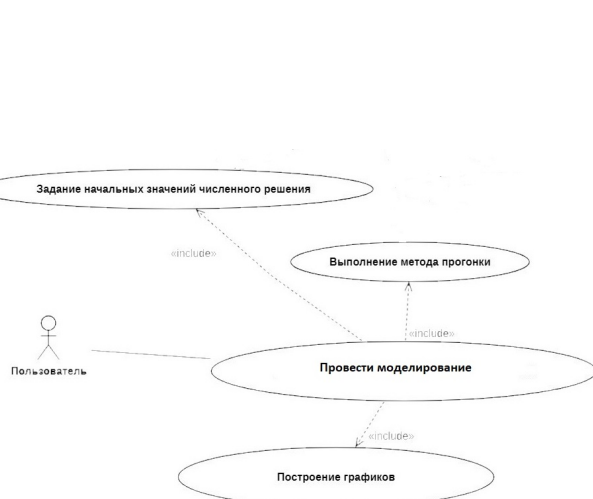


Рис. 4.12: Диграмма сценариев для программы, реализующей сингулярную модель роста-распространения

4.4. Результаты вычислительного эксперимента

4.4.1. Результаты вычислительного эксперимента для регулярной модели роста-распространения

В этом параграфе приведены результаты численного эксперимента для модельной задачи (2.1.1)-(2.1.3).

Численная реализация производилась на языке Python.

Рассмотренные уравнения роста и распространения в регулярном и сингулярном случаях, как отмечено выше, являются универсальным средством моделирования различных диффузионно–логистических процессов. Для тестирования разработанных программ возможны следующие подходы:

1. Если явное представление решения неизвестно, но имеется информация о ходе изучаемого процесса, собранная в результате наблюдений, можно сравнить полученные численные результаты с данными наблюдений.

2. Если известно явное представление решения, его значения в узлах можно использовать для сравнения со значениями, полученными в результате численной реализации.

Используются оба подхода. В общем случае явное представление решения рассматриваемых задач при произвольных начальных и краевых условиях неизвестно, однако имеется уникальная их комбинация, при которой известно явное представление решения.

Для сравнения результатов численного эксперимента с данными наблюдений было выбрано применение изучаемых уравнений описанию роста и распространения глиомы.

Серия следующих модельных примеров демонстрирует распространение опухоли у человека. Чтобы предсказать продолжительность выживания, необходимо иметь меру «фатальной опухолевой нагрузки». Известно, что фатальный размер опухоли, наблюдаемый на МРТ при аутопсии составляет 35 мм. Медианное время выживаемости пациентов от 32 до 36 недель.

Радиусы сфер, эквивалентных объемам, позволили рассчитать скорость пролиферации ρ и скорость D миграции клеток. Особое значение имеет отношение этих параметров D/ρ , называемое «индекс невидимости». В построенной дискретной математической модели роста и распространения глиомы параметр $1/A$ отвечает за указанный индекс. На основе данных диагностических МРТ-объемов опухолей были рассчитаны фактические соотношения D/ρ , где D (мм²/день) — коэффициент рассеивания, определяющий чистую скорость миграции опухолевых клеток, ρ (1/день) представляет чистую скорость пролиферации для каждого из пациентов [106]. В научной статье [94], посвященной моделированию роста и распространения глиомы, указаны диапазоны изменения скорости миграции D от 0.005 до 0.3 мм²/день, скорости пролиферации ρ от 0.0025 до 0.04 1/день.

Модельные примеры будут рассмотрены с использованием различных комбинаций констант скорости диффузии и пролиферации для различных времен наблюдения: 4, 9, 13, 26, 39, 52, 65 и 81 неделя. Более конкретно, результаты будут касаться комбинаций [низкая диффузия, низкая пролиферация], [высокая диффузия, низкая пролиферация], [низкая диффузия, высокая пролиферация], [высокая диффузия, высокая пролиферация] и [средняя диффузия, средняя пролиферация].

При проведении моделирования были приняты следующие предположения:

- 1) в начальный момент времени концентрация клеток глиомы равна 0.
- 2) на левом конце рассматриваемого отрезка, являющегося очагом возникновения опухоли, значение функции концентрации клетками глиомы равно 1. Очевидно, что на левом конце допущено рассогласование начальных и граничных данных, однако допущение такого разрыва соответствует тому, что в начальный момент времени очаг опухоли сосредоточен в одной точке, в которой помещено начало координат.
- 3) на правом конце рассматриваемого пространственного отрезка такая концентрация равна 0.

Для всех рассматриваемых примеров значение сеточного параметра σ принимается равным 0.5, значение параметра β выбирается в зависимости от отношения ρ/D , т.е. $\rho/(2D) < \beta < \rho/D$.

Первый модельный пример проводился для комбинации значений: низкая диффузия $D = 0.035$ мм²/неделю, низкая пролиферация $\rho = 0.0175$ 1/неделю, отрезке изменения пространственной переменной от 0 до 10 мм, временной переменной от 0 до 100 недель, значениях весовых параметров $\sigma = 0.5$, $\beta = 0.45$.

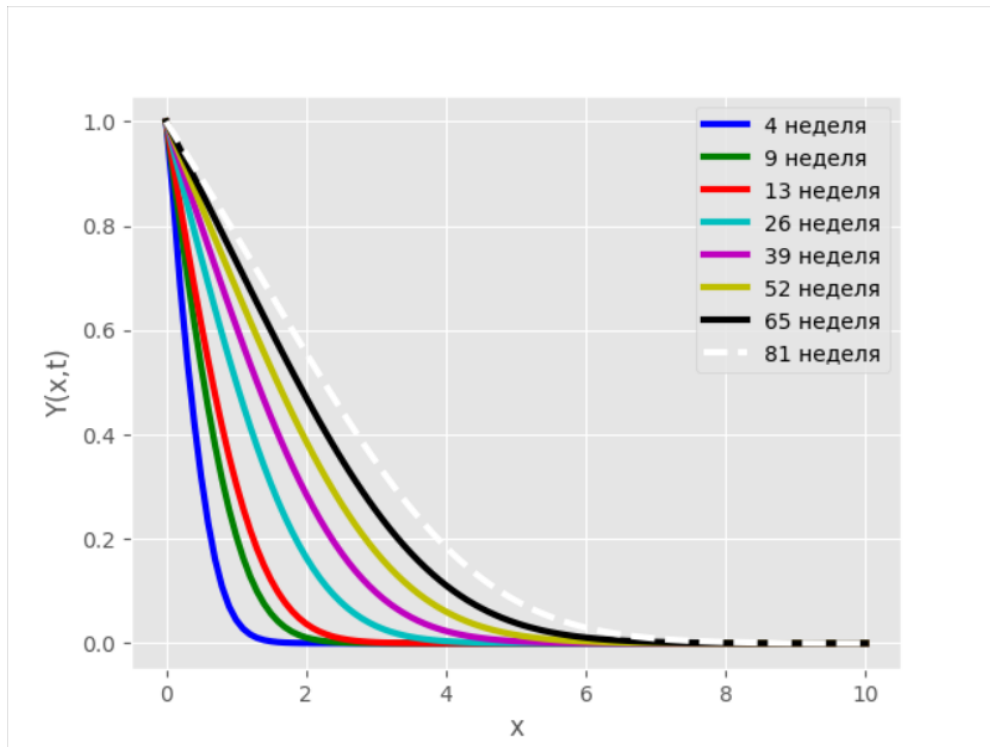


Рис. 4.13: Моделирование роста и распространения глиомы у человека, $D = 0.035$ мм²/неделю, $\rho = 0.0175$ 1/неделю

Границы по результатам изображений T1-Gd и T2, полученных с помощью магнитно-резонансной томографии, могут представлять собой концентрации опухолевых клеток, равные 80 % и 16 % соответственно от максимальной концентрации. То, что опухолевые клетки распространяются гораздо дальше, чем видимая аномалия, подтверждается культивированием злокачественных клеток.

На Рисунке 4.13 представлены результаты моделирования, согласно которым концентрация опухолевых клеток в 16% на 81 неделе наблюдений соответствует размеру опухоли в 4.5 мм.

Следующий модельный пример проводился для комбинации значений: высокая диффузия $D = 2.1$ мм²/неделю, низкая пролиферация $\rho = 0.0175$ 1/неделю, отрезке изменения пространственной переменной от 0 до 50 мм, временной переменной от 0 до 100 недель, значениях весовых параметров $\sigma = 0.5$, $\beta = 0.005$.

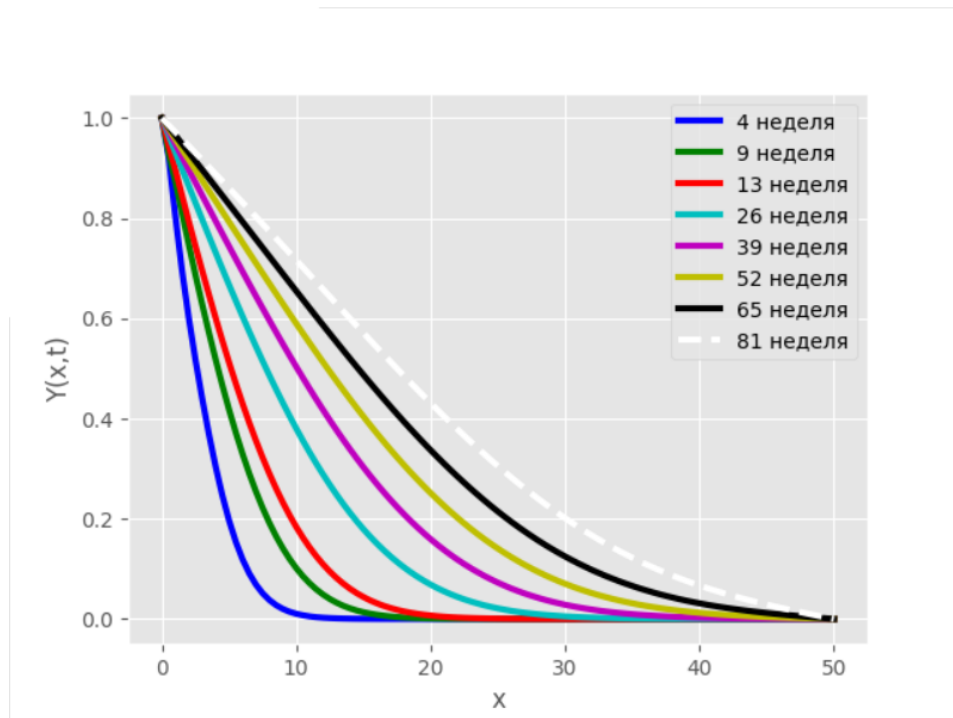


Рис. 4.14: Моделирование роста и распространения глиомы у человека, $D = 2.1$ мм²/неделю, $\rho = 0.0175$ 1/неделю

Из Рисунка 4.14 видно, что концентрация опухолевых клеток в 16%, при которой достигается фатальный размер опухоли 35 мм, наступает между 65 и 81 неделей.

Для третьего модельного примера принимались комбинации значений: низкая диффузия $D = 0.035$ мм²/неделю, высокая пролиферация $\rho = 0.28$ 1/неделю, отрезке изменения пространственной переменной от 0 до 20 мм, временной переменной от 0 до 100 недель, значениях весовых параметров $\sigma = 0.5$, $\beta = 5$.

Моделирование с указанными параметрами (Рис. 4.15) демонстрирует, что при концентрации опухолевых клеток в 16% на 81 неделе наблюдений видимый размер опухоли составляет 14.8 мм.

Для четвертого модельного примера принимались комбинации значений: высокая диффузия $D = 2.1$ мм²/неделю, высокая пролиферация $\rho = 0.28$ 1/неделю, отрезке изменения пространственной переменной от 0 до 120 мм, временной переменной от 0 до 100 недель, значениях весовых параметров $\sigma = 0.5$, $\beta = 0.07$.

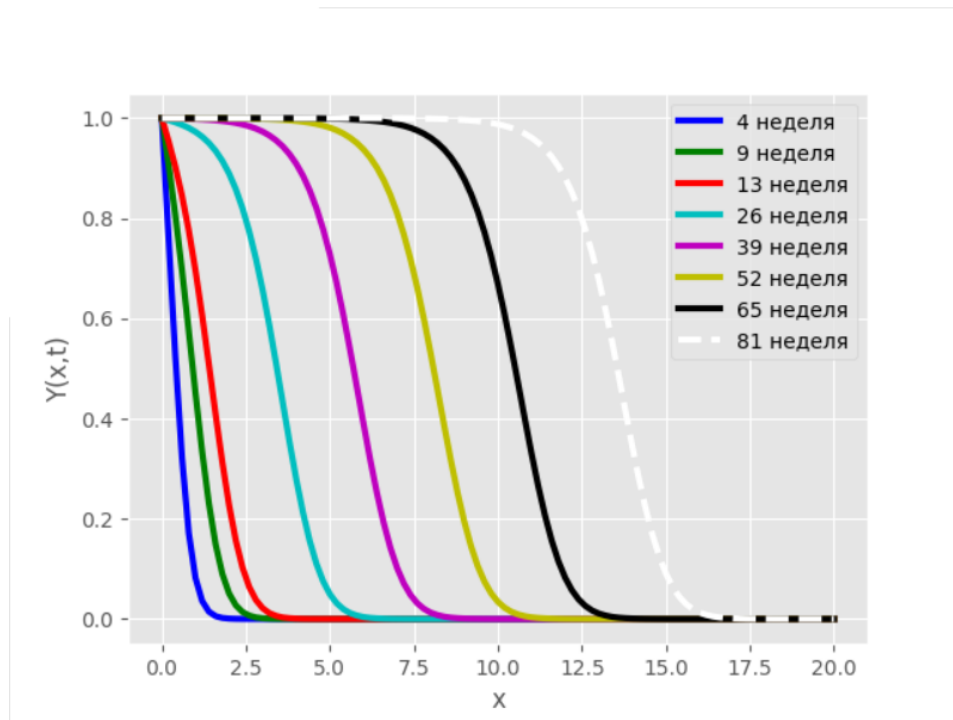


Рис. 4.15: Моделирование роста и распространения глиомы у человека, $D = 0.035 \text{ мм}^2/\text{неделю}$, $\rho = 0.28 \text{ 1}/\text{неделю}$

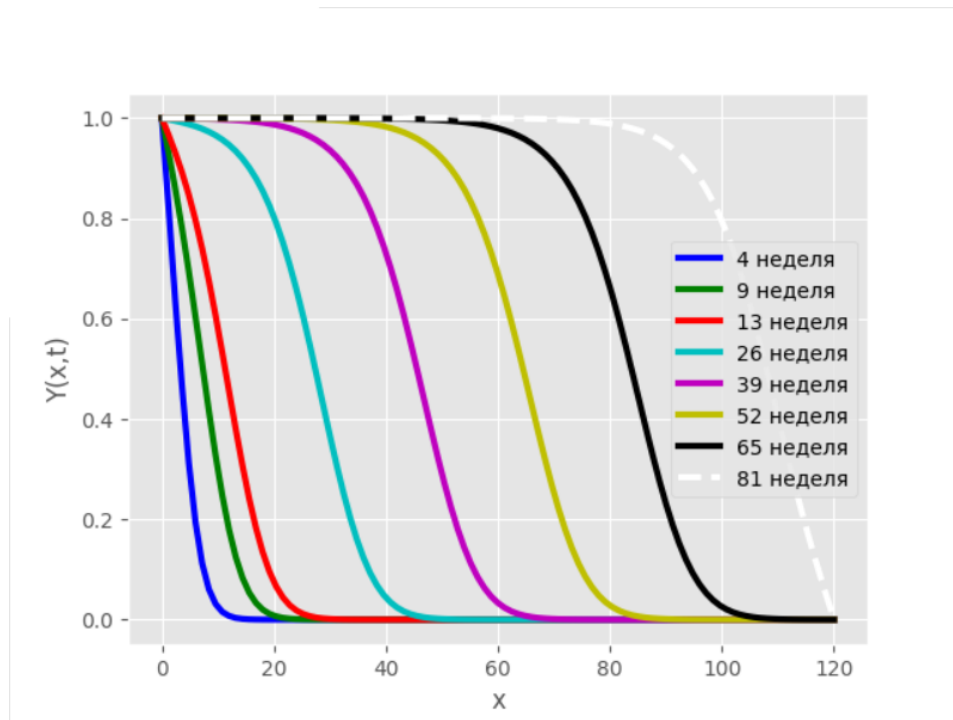


Рис. 4.16: Моделирование роста и распространения глиомы у человека, $D = 2.1 \text{ мм}^2/\text{неделю}$, $\rho = 0.28 \text{ 1}/\text{неделю}$

Как видно из графиков (Рис. 4.16), концентрация опухолевых клеток в 80%, при которой достигается фатальный размер опухоли в 35 мм, наблюдается в районе 26 недели.

Для последнего примера моделирования роста и распространения глиомы были приняты средние значения значения диффузии и пролиферации: $D = 1.8$ мм²/неделю, $\rho = 0.19$ 1/неделю, отрезке изменения пространственной переменной от 0 до 80 мм, временной переменной от 0 до 100 недель, значениях весовых параметров $\sigma = 0.5$, $\beta = 0.08$. При таком выборе параметров D и ρ , наиболее распространенное значение «индекса невидимости» составляет 9.47 мм² (см. [106]) Рис. 4.17.

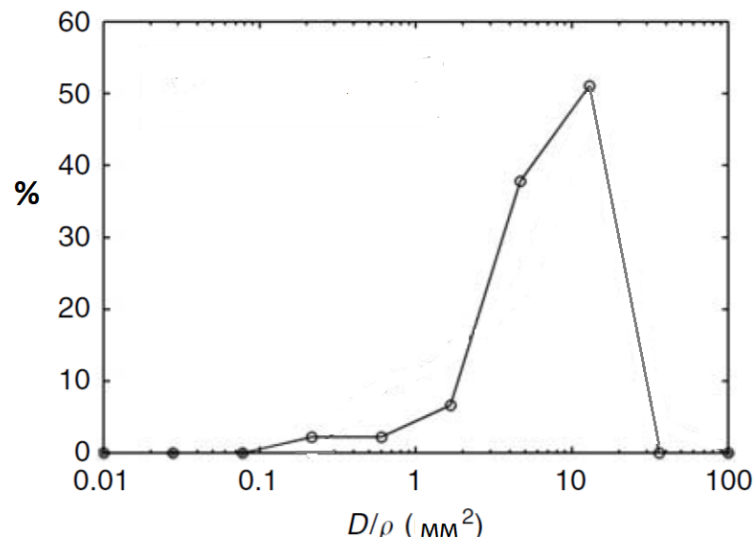


Рис. 4.17: Процентное распределение значений «индекса невидимости»

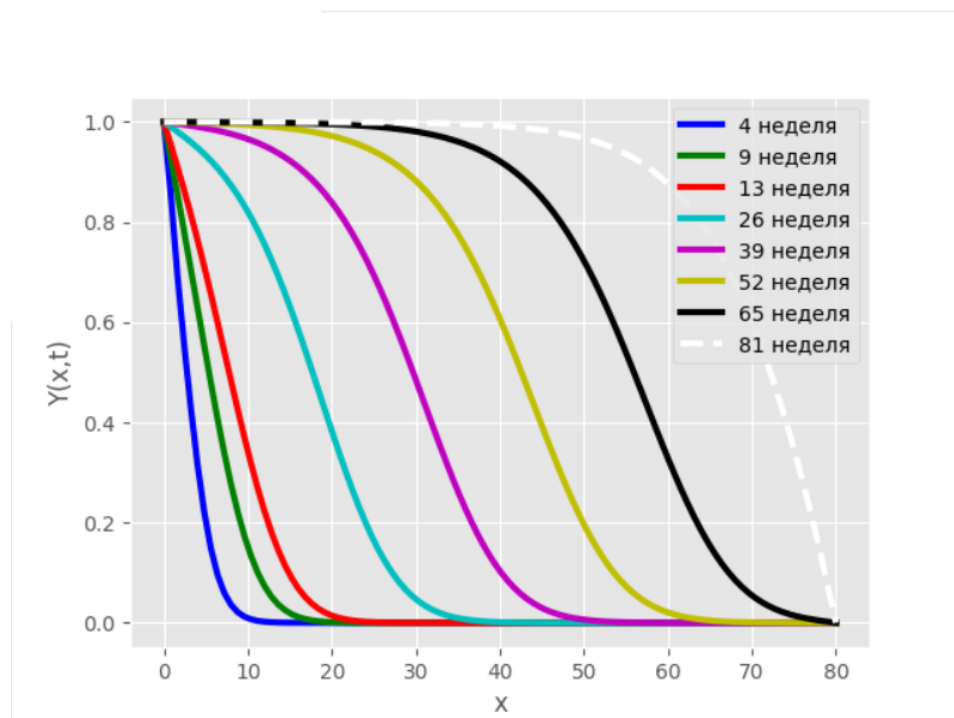


Рис. 4.18: Моделирование роста и распространения глиомы у человека, $D = 1.8$ мм²/неделю, $\rho = 0.19$ 1/неделю

Из графиков, представленных на Рисунке 4.18, видно что фатальный размер опухоли 35 мм будет достигнут между 26 и 39 неделями прогнозирования.

Следующий модельный пример проводился с целью расчета абсолютной погрешности вычисления. Результаты численного решения сравнивались с точным решением [24], определенным по формуле [10]:

$$u(x, t) = \frac{1}{(1 + e^{1/\sqrt{6}x - 5t/6})^2}.$$

С целью проверки гипотезы в численных расчетах осуществляется перебор некоторых значений весов.

Рассматривалась задача

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + u(1 - u), 0 < x < 1, 0 < t \leq 4,$$

$$u(0, t) = \frac{1}{(1 + e^{-5t/6})^2}, 0 < t \leq 4,$$

$$u(1, t) = \frac{1}{(1 + e^{1/\sqrt{6} - 5t/6})^2}, 0 < t \leq 4,$$

$$u(x, 0) = \frac{1}{(1 + e^{1/\sqrt{6}x})^2}, 0 \leq x \leq 1.$$

со значениями весовых коэффициентов $\sigma = 0, 5$, $\beta = 0, 6$. Расчеты приведены для количества разбиений $N = 10, 50$ по оси Ox и количества отрезков разбиения $M = 40, 100, 400$ по оси Ot .

На Рисунке 4.19 изображены графики точного решения $U(x, t)$ и численного решения $Y(x, t)$ в различные моменты времени: $t_1 = T/4$, $t_2 = T/2$, $t_3 = T$ при $N = 10, M = 40$.

Как видно из рисунка, графики точного и численного решения совпадают. Кроме того, полученный графический результат соответствует поведению функции на границах интервала:

$$u(0, t) = \frac{1}{(1 + e^{-5t/6})^2} \xrightarrow{t \rightarrow \infty} 1,$$

$$u(1, t) = \frac{1}{(1 + e^{1/\sqrt{6} - 5t/6})^2} \xrightarrow{t \rightarrow \infty} 1.$$

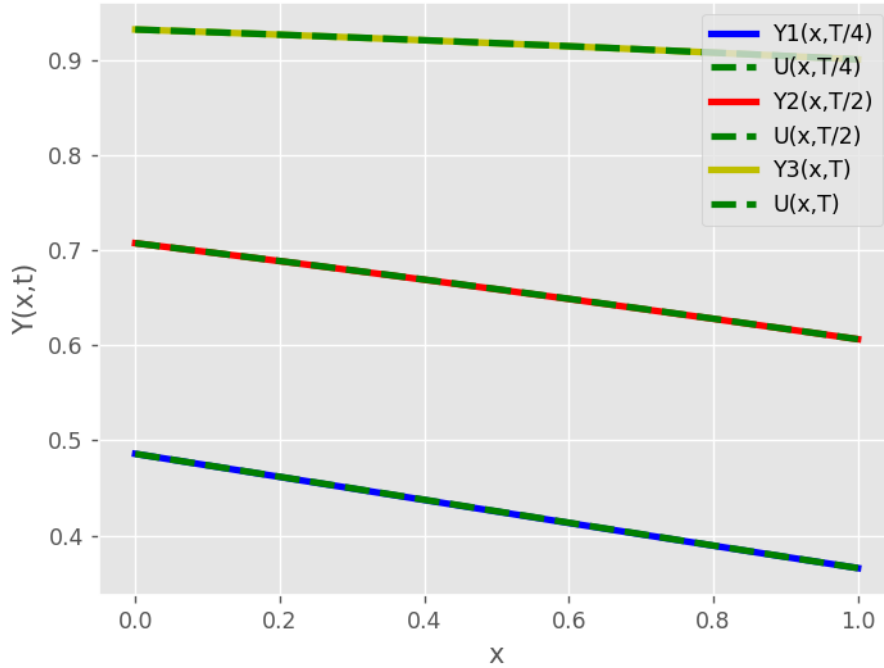


Рис. 4.19: Численное и точное решения в различные моменты времени для $\sigma = 0,5$, $\beta = 0,6$, $N = 10$, $M = 40$

В Таблице 4.1 представлены результаты расчета абсолютных ошибок для первого примера.

M	$Error_{t_1}$	$Error_{t_2}$	$Error_{t_3}$
N = 10			
40	2.57065e-05	2.34178e-05	5.53951e-06
100	4.08557e-06	4.22129e-06	8.53315e-07
400	2.24928e-07	7.93971e-07	1.58376e-08
N = 50			
40	9.29992e-06	7.98158e-06	1.90455e-06
100	1.49558e-06	1.2847e-06	3.03764e-07
400	9.43145e-08	8.76976e-08	1.83649e-08

Таблица 4.1: Абсолютные ошибки в разные моменты времени для двух значений шага пространственной сетки и трех значений шага временной сетки

Сравнение абсолютных ошибок демонстрирует, что предложенный метод позволяет добиться хорошей точности и на грубой сетке.

Таблица 4.2 содержит относительную погрешность численного решения, выраженную в процентах.

В следующей таблице приведены абсолютные погрешности расчетов для $N = 50$, $M = 40, 400, 1000$ и различных значений сеточных параметров σ и β .

M	$Error_{t_1}$	$Error_{t_2}$	$Error_{t_3}$
N = 10			
40	0.00280051	0.00355238	0.00130186
100	0.000445089	0.000640349	0.00020054
400	2.45041e-05	0.000120442	3.72205e-06
N = 50			
40	0.00100039	0.00114312	0.000401929
100	0.00016088	0.000183995	6.41051e-05
400	1.01454e-05	1.25601e-05	3.87565e-06

Таблица 4.2: Относительные ошибки в разные моменты времени для двух значений шага пространственной сетки и трех значений шага временной сетки, %

M	$Error_{t_1}$	$Error_{t_2}$	$Error_{t_3}$
$\sigma = 0.7, \beta = 0.7$			
40	0.000665715	0.00052896	0.000139527
400	6.90311e-05	5.3996e-05	1.42844e-05
1000	2.76973e-05	2.13016e-05	5.74531e-06
$\sigma = 0.3, \beta = 0.9$			
40	0.000405633	0.000358037	0.000125668
400	3.98215e-05	3.47889e-05	1.21221e-05
1000	1.59088e-05	1.38932e-05	4.83675e-06
$\sigma = 1.5, \beta = 0.7$			
40	0.000333032	0.000232901	2.75878e-05
400	3.46869e-05	2.25883e-05	2.60522e-06
1000	1.39021e-05	9.00973e-06	1.03895e-06

Таблица 4.3: Абсолютные ошибки в разные моменты времени для различных значений сеточных параметров

Результаты, представленные в Таблице 4.3, свидетельствуют о том, что используемая разностная схема обладает порядком аппроксимации не ниже $O(h^2 + \tau)$.

В следующем модельном примере расширим интервал пространственной переменной. Будем рассматривать задачу:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + u(1 - u), 0 < x < 1, 0 < t \leq 4,$$

$$u(-20, t) = \frac{1}{(1 + e^{-20/\sqrt{6}-5t/6})^2}, 0 < t \leq 4,$$

$$u(20, t) = \frac{1}{(1 + e^{20/\sqrt{6}-5t/6})^2}, 0 < t \leq 4,$$

$$u(x, 0) = \frac{1}{(1 + e^{1/\sqrt{6}x})^2}, -20 \leq x \leq 20.$$

Расчет произведем для значений весовых коэффициентов $\sigma = 0,5$, $\beta = 0,5$ и количестве разбиений $N = 200$ по оси Ox и количестве отрезков разбиения $M = 400$ по оси Ot .

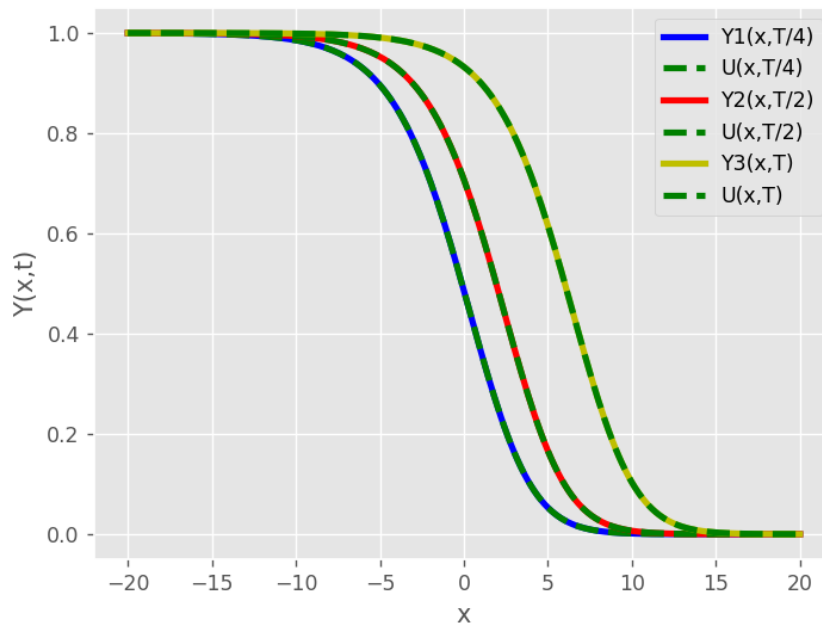


Рис. 4.20: Численное и точное решения в различные моменты времени для $\sigma = 0,5$, $\beta = 0,5$, $N = 200$, $M = 400$, $-20 \leq x \leq 20$

График демонстрирует, что численное решение совпадает с точным решением, имеющим профиль «бегущей волны». В Таблице 4.4 приведены абсолютные и относительные ошибки численного решения на разных временах.

M	$Error_{t_1}$	$Error_{t_2}$	$Error_{t_3}$
Абсолютная ошибка			
400	2.65924e-08	2.08158e-08	7.09457e-09
1000	2.78334e-08	2.17883e-08	7.42831e-09
Относительная ошибка			
400	2.65932e-06	2.08191e-06	7.09721e-07
1000	2.78342e-06	2.17919e-06	7.43107e-07

Таблица 4.4: Абсолютные и относительные ошибки численного решения на разных временах для двух значений шага временной сетки

4.4.2. Результаты вычислительного эксперимента для сингулярной модели роста–распространения

В этом параграфе приведены результаты численного эксперимента для модельной задачи (3.3.1)-(3.3.3).

Для всех рассматриваемых далее модельных примеров параметр γ принимается равным 2, значение параметра σ принимается равным 0.5, значение параметра β выбирается удовлетворяющим неравенству $\rho/2 < \beta < \rho$.

Модельные примеры будут рассмотрены с использованием различных комбинаций констант скорости диффузии и пролиферации: [низкая диффузия, низкая пролиферация], [высокая диффузия, низкая пролиферация], [низкая диффузия, высокая пролиферация], [высокая диффузия, высокая пролиферация] и [средняя диффузия, средняя пролиферация] и времен наблюдения: 4, 9, 13, 26, 39, 52, 65 и 81 неделя.

Параметры для серии модельных экспериментов перечислены в Таблице 4.5. Рисунки 4.21-4.25 иллюстрируют результаты моделирования, полученные при проведении указанных вычислительных экспериментов.

№	ρ	D	$[x_0, x_N]$	$[t_0, t_N]$	σ	β
1	0.0175	0.035	[0, 10]	[0, 100]	0.5	0.01
2	0.0175	2.1	[0, 50]	[0, 100]	0.5	0.01
3	0.28	0.035	[0, 20]	[0, 100]	0.5	0.17
4	0.28	2.1	[0, 120]	[0, 100]	0.5	0.17
5	0.19	1.8	[0, 80]	[0, 100]	0.5	0.11

Таблица 4.5: Параметры для серии вычислительных экспериментов

При проведении моделирования были приняты следующие предположения:

1) в начальный момент времени концентрация клеток глиомы равна 0, за исключением малого пространственного отрезка, являющегося очагом.

2) на левом конце рассматриваемого отрезка, являющегося очагом возникновения опухоли, наблюдается свободный рост клеток глиомы.

3) на правом конце рассматриваемого пространственного отрезка концентрация клеток глиомы равна 0.

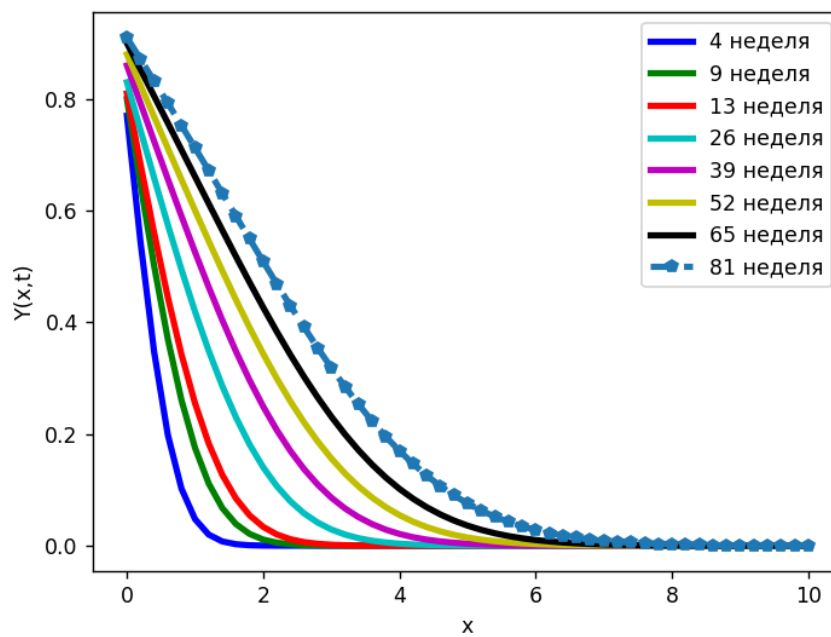


Рис. 4.21: Моделирование роста и распространения глиомы у человека, $D = 0.035 \text{ мм}^2/\text{неделю}$, $\rho = 0.0175 \text{ 1}/\text{неделю}$

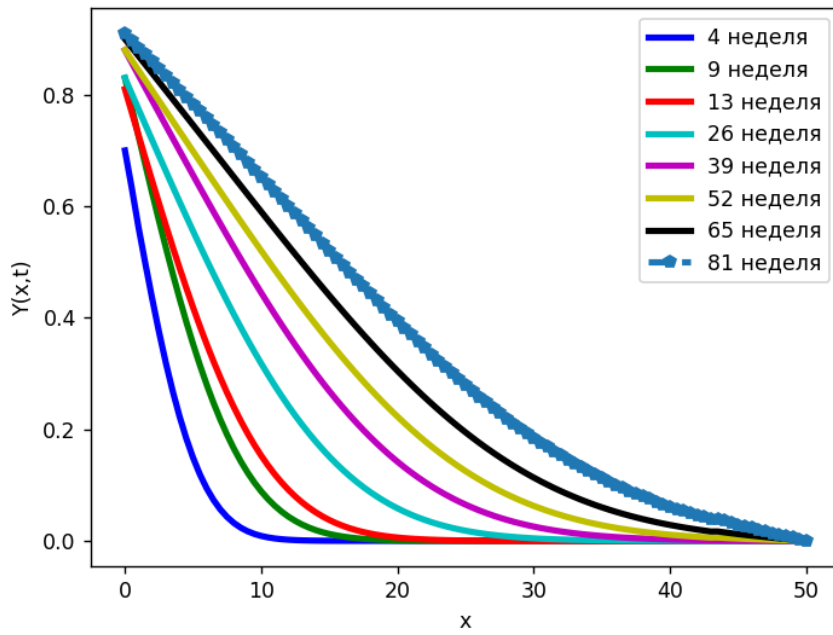


Рис. 4.22: Моделирование роста и распространения глиомы у человека, $D = 2.1$ $\text{мм}^2/\text{неделю}$, $\rho = 0.0175$ $1/\text{неделю}$

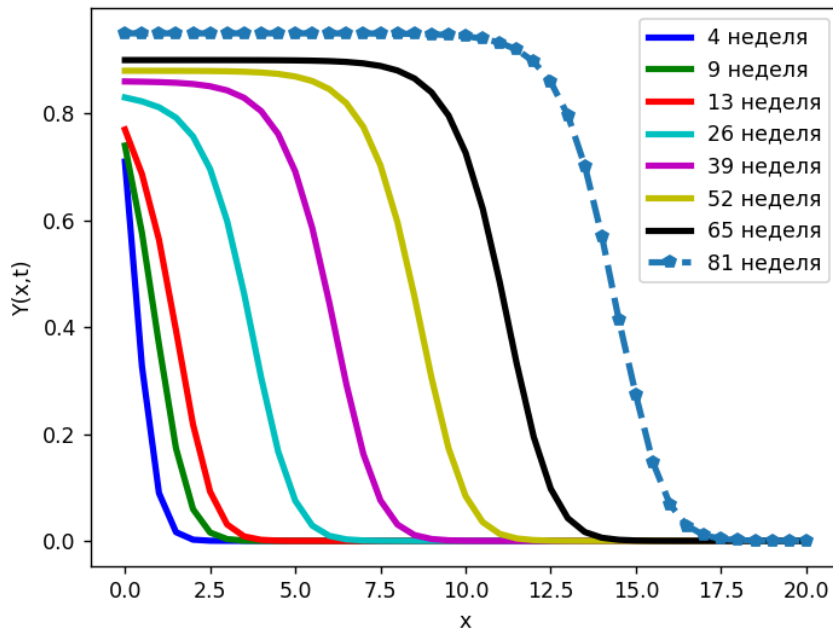


Рис. 4.23: Моделирование роста и распространения глиомы у человека, $D = 0.035$ $\text{мм}^2/\text{неделю}$, $\rho = 0.28$ $1/\text{неделю}$

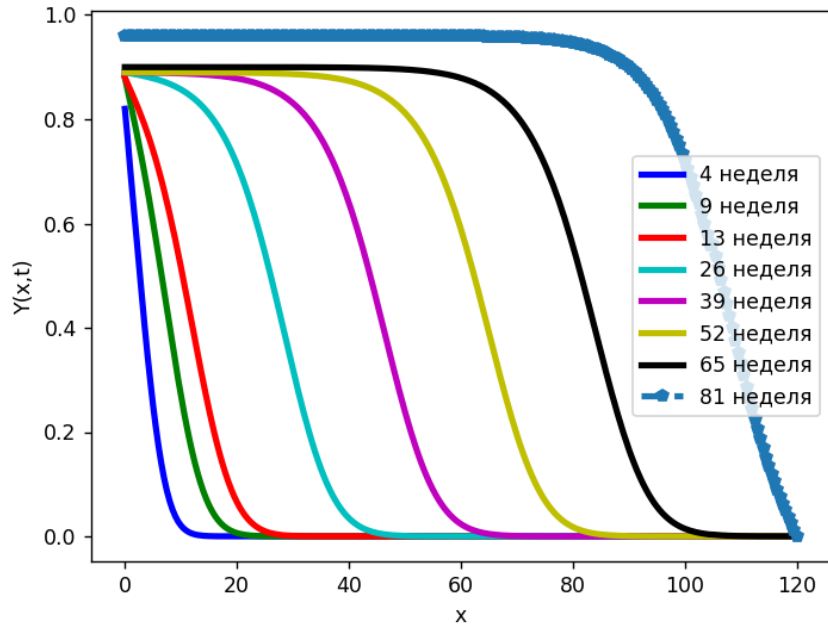


Рис. 4.24: Моделирование роста и распространения глиомы у человека, $D = 2.1$ мм²/неделю, $\rho = 0.28$ 1/неделю

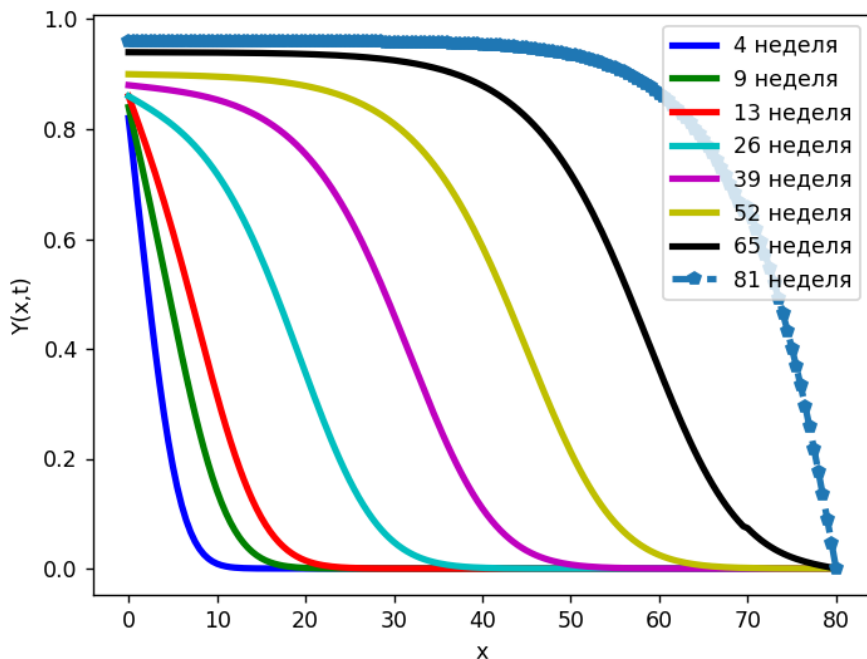


Рис. 4.25: Моделирование роста и распространения глиомы у человека, $D = 1.8$ мм²/неделю, $\rho = 0.19$ 1/неделю

Сравнительный анализ графиков, полученных при использовании сингулярной дискретной модели роста–распространения глиомы 4.21-4.25, и результатов моделирования для регулярной модели, отображенной на Рисунках

4.13-4.18, демонстрирует адекватность модели, а также соответствие натурным данным.

4.5. Вычислительная сложность

Оценим трудоемкость метода прогонки. Прямой ход требует $6n$ операций, обратный ход еще $2n$ операций. Итого, необходимо совершить $8n = O(n)$ операций. Количество требуемых операций гораздо меньше, чем в методе Гаусса, который требует $O(n^3)$ операций. Метод прогонки является экономичным методом, поскольку число операций, необходимых для вычисления каждой неизвестной системы, не зависит от размерности системы. Другими словами, на вычисление каждой компоненты приходится 8 итераций, что не зависит от n .

Метод Ньютона для систем нелинейных уравнений обладает итоговой сложностью равной $O(Ln^3)$, где L — количество итераций, необходимых для сходимости алгоритма.

4.6. Выводы

1. Для уникального сочетания начального профиля и граничных режимов, допускающего явное решение в виде бегущей волны, результаты вычислительного эксперимента для регулярной модели роста–распространения глиомы сравнены с точным решением. Расчеты показали высокую точность приближения. Для набора входных данных, полученных в результате натуральных измерений, результаты вычислительного эксперимента согласуются с данными наблюдений.

2. Для сингулярной модели роста–распространения получены результаты численного эксперимента, согласующиеся с натурными наблюдениями.

Заключение

В диссертации установлены следующие новые научные результаты:

1. Разработан, обоснован и протестирован эффективный линейный вычислительный метод для непрерывной нелинейной модели роста–распространения с применением современных компьютерных технологий. Разработанный метод дискретизации нелинейной модели роста–распространения отличается тем, что он приводит к системе линейных алгебраических уравнений. При этом он позволяет получить оценку порядка аппроксимации и достаточное условие устойчивости.

2. Разработана новая дискретная математическая модель и эффективный численный метод дискретизации непрерывной сингулярной модели распространения. Модель реализована с помощью проекционно–сеточного метода Бубнова–Галеркина, отличающегося применением финитных сплайнов особого вида и позволяющего доказать оценку погрешности в весовом функциональном пространстве. Предложена линейная дискретная модель для сингулярной нелинейной непрерывной модели роста–распространения. Разработана аппроксимирующая дискретная модель для плоской сингулярной стационарной задачи распределения субстанции, которая отличается учетом ослабленных требований к гладкости решения и позволяет получить априорную оценку.

3. На основе разработанной в рамках диссертации технологии создания дискретных линейных математических моделей создан комплекс программ для исследования проблемы роста–распространения и проведения вычислительных экспериментов.

Полученные в диссертации результаты, положения и программный комплекс могут быть использованы в различных предметных областях, связанных с моделированием процессов роста–распространения: в медицине, эпидемиологии, популяционной динамике, теории горения.

Список литературы

- [1] Абузярова, Р.Т. Математическая модель лейкоза / Р.Т. Абузярова, Е.П. Колпак // Международный научно-исследовательский журнал. — 2017. — № 12(66). — С. 6–12.
- [2] Арнольд, В.И. Обыкновенные дифференциальные уравнения / В.И. Арнольд. — М.: МЦНМО, 2012. — 344 с.
- [3] Астанин, С.А. Трехмерная модель роста «неваскуляризованной» опухоли в ткани / С.А. Астанин, А.И. Лобанов // Математика. Компьютер. Образование. — 2005. — № 1. — С. 759–769.
- [4] Борисов, А.В. Численное моделирование одномерной популяционной динамики с нелокальным взаимодействием / А.В. Борисов, Р.О. Резаев, А.Ю. Трифонов // Известия Томского политехнического университета [Известия ТПУ]. — 2009. — Т. 315, № 2. — С. 24–28.
- [5] Виноградова, Г.А. О решении сингулярной задачи вариационным методом / Г.А. Виноградова // Вестник факультета ПММ. — 2015. — № 10. — С. 39–42.
- [6] Гусман, Ю.А. Оценки сходимости конечно-разностных схем для вырожденных эллиптических уравнений / Гусман Ю.А., Оганесян Л.А. // Журнал вычислительной математики и математической физики. — 1965. — № 2. — С. 351–357.
- [7] Житомирский, Я.И. Задача Коши для систем линейных уравнений в частных производных с дифференциальными операторами типа Бесселя / Я.И. Житомирский // Математический сборник. — 1955. — № 36(78): 2. — С. 299–310.

- [8] Жукова, И.В. Математические модели злокачественной опухоли / И.В. Жукова, Е.П. Колпак // Вестник Санкт-Петербургского университета. — 2014. — № 3: 10. — С. 5–18.
- [9] Жукова, И.В. Математическая модель солидной опухоли / И.В. Жукова, Е.П. Колпак // Сборник статей по материалам XIII международной научно-практической конференции. — 2013. — № 12. — С. 18–25.
- [10] Ильина, К.П. Эффективный численный метод решения задачи Фишера–Колмогорова–Петровского–Пискунова / К.П. Ильина // Международный научно-исследовательский журнал. — 2023. — № 3(129).
- [11] Калиткин, Н.Н. Численные методы / Н.Н. Калиткин. — М.: Наука, 1978. — 512 с.
- [12] Катрахов, В.В. Метод конечных элементов для некоторых вырождающихся эллиптических краевых задач / В.В. Катрахов, А.А. Катрахова // ДАН СССР. — 1984. — Т. 279 № 4. — С. 799–802.
- [13] Катрахова, А.А. Формула Тейлора с оператором Бесселя / А.А. Катрахова // Корректные краевые задачи для неклассических уравнений математической физики. — 1981. — Т. 249, № 1. — С. 34–37.
- [14] Катрахова, А.А. Сингулярные краевые задачи и приближенные методы их решения: диссертация на соискание кандидата физико-математических наук: 01.01.02 / Катрахова Алла Анатольевна. — Воронеж, 1982. — 129 с.
- [15] Киприянов, И.А. Краевые задачи сингулярных эллиптических операторов в частных производных / И.А. Киприянов // Доклады Академии наук. — 1970. — Т. 195, № 1. — С. 32–35.
- [16] Киприянов, И.А. Фундаментальные решения для однородных В-гиперболических уравнений / И.А. Киприянов, Л.А. Иванов // Сибирский математический журнал. — 1980. — Т. 21, № 4. — С. 95–102.
- [17] Киприянов, И.А. Получение фундаментальных решений для однородных уравнений с особенностями по нескольким переменным / И.А. Киприянов, Л.А. Иванов // Теоремы вложения и их приложения к задачам математической физики. Труды семинара С.Л. Соболева. — 1983. — № 1. — С. 55–77.

- [18] Киприянов, И.А. Сингулярные эллиптические краевые задачи / И.А. Киприянов. — М.: Наука, 1997. — 199 с.
- [19] Киприянов, И.А. Преобразование Фурье–Бесселя и теоремы вложения для весовых классов / И.А. Киприянов // Исследования по теории дифференцируемых функций многих переменных и ее приложениям. Часть 2, Сборник работ, Тр. МИАН СССР. — 1967. — Т. 89. — С.130–213.
- [20] Колобов, А.В. Математическая модель роста опухоли с учетом дихотомии миграции и пролиферации / А.В. Кололобов, А.А. Анашкина, В.В. Губернов, А.А. Полежаев // Компьютерные исследования и моделирование. — 2009. — Т. 1 № 4. — С. 415–422.
- [21] Колобов, А.В. Автоволны в модели роста инвазивной опухоли / А.В. Кололобов, В.В. Губернов, А.А. Полежаев // Биофизика. — 2009. — Т. 54 № 2. — С. 332–342.
- [22] Колобов, А.В. Влияние случайной подвижности злокачественных клеток на устойчивость фронта опухоли / А.В. Кололобов, А.А. Полежаев // Компьютерные исследования и моделирование. — 2009. — Т. 1 № 2. — С. 225–232.
- [23] Колмогоров, А.Н. Исследование уравнения диффузии, соединенной с возрастом вещества, и его применение к одной биологической проблеме / А.Н. Колмогоров, И.Г. Петровский, Н.С. Пискунов // Бюллетень МГУ, Серия А, Математика и механика. — 1937. — Т. 1 № 64. — С. 1–16.
- [24] Кудряшов, Н.А. О точных решениях уравнений семейства Фишера / Н.А. Кудряшов // Теоретическая и математическая физика, 1993. — Т. 2 вып. 94. — С. 296–306.
- [25] Левитан, Б.М. Разложение по функциям Бесселя в ряды и интегралы Фурье / Б.М. Левитан // Успехи математических наук. — 1951. — VI, в. 2. — С. 102–143.
- [26] Ляхов, Л.М. Об одной задаче И.А. Киприянова для сингулярного ультрагиперболического уравнения: научное издание / Л.М. Ляхов, И.П. Половинкин, Э.Л. Шишкина // Дифференциальные уравнения. — 2014. — Т. 50 № 4. — С. 516–528.

- [27] Ляхов, Л.М. Весовые сферические функции и потенциалы Рисса, порожденные обобщенным сдвигом: научное издание / Л.М. Ляхов. — Воронеж: ВГТА, 1997. — 145 с.
- [28] Ляхов, Л.Н. В-гиперсингулярные интегралы и их приложения к описанию функциональных классов Киприянова и к интегральным уравнениям с В-потенциальными ядрами / Ляхов Л.Н. — Липецк: ЛГПУ, 2007. — 232 с.
- [29] Марчук, Г.И. Методы вычислительной математики / Г.И. Марчук. — М.: Наука, 1977. — 456 с.
- [30] Марчук, Г.И. Введение в проекционно-сеточные методы / Г.И. Марчук, В.И. Агошков. — М.: Наука, 1981. — 416 с.
- [31] Матус, П.П. Монотонные разностные схемы повышенного порядка точности для параболических уравнений / П.П. Матус, Б.Д. Утебаев // Доклады НАН Беларуси. — 2020. — Т. 64 № 4. — С. 391–398.
- [32] Мешков, В.З. Об устойчивости стационарного решения уравнения Хотеллинга / В.З. Мешков, И.П. Половинкин, М.Е. Семенов // Обзорение прикладной и промышленной математики. — 2002. — Vol. 9 № 1. — P. 226–227.
- [33] Мизохата, С. Теория уравнений с частными производными / С. Мизохата [Перевод с яп. Ю.В. Егорова; Под ред. О.А. Олейник]. — М.: Мир, 1977. — 504 с.
- [34] Михлин, С.Г. Вариационные методы в математической физике / С.Г. Михлин. — 2-е изд. — М.: Наука, 1970. — 510 с.
- [35] Михлин, С.Г. Численная реализация вариационных методов / С.Г. Михлин. — М.: Наука, 1966. — 432 с.
- [36] Муравник, А.Б. Функционально-дифференциальные параболические уравнения: интегральные представления и качественные свойства решений задачи Коши / А.Б. Муравник // Современная математика. Фундаментальные направления. — 2014. — Т. 52. — С. 3–141.
- [37] Обэн, Ж.П. Приближенное решение эллиптических краевых задач / Ж.П. Обэн; перевод с англ. Ю.А. Кузнецова и А.М. Мацокина; под ред. Г.И. Марчука. — М.: Мир, 1977. — 383 с.

- [38] Песин, Я.Б. Некоторые физические модели, описываемые уравнением реакции–диффузии, и цепочки связанных отображений / Я.Б. Песин, А.А. Юрченко // УМН. — 2004. — Т. 59, Вып. 3(357). — С. 81–114.
- [39] Понтрягин, Л.С. Обыкновенные дифференциальные уравнения / Л.С. Понтрягин. — М.: Ленанд, 2024. — 344 с.
- [40] Пу, Т. Нелинейная экономическая динамика / Т. Пу. — Ижевск: Издательский дом «Удмуртский университет», 2000. — 200 с.
- [41] Самарский, А.А. Разностные схемы для дифференциальных уравнений с обобщенными решениями / А.А. Самарский, Р.Д. Лазаров, В.Л. Макаров. — Москва, 1987. — 296 с.
- [42] Самарский, А.А. Введение в теорию разностных схем / А.А. Самарский. — М.: Наука, 1971. — 553 с.
- [43] Самарский, А.А. Устойчивость разностных схем / А.А. Самарский, А.В. Гулин. — М.: Наука, 1973. — 415 с.
- [44] Самарский, А.А. Численные методы: учебное пособие для вузов / А.А. Самарский, А.В. Гулин. — М.: Наука. Физматлит, 1989. — 432 с.
- [45] Самарский, А.А. Разностные методы для эллиптических уравнений / А.А. Самарский, В.Б. Андреев. — М.: Наука, 1976. — 352 с.
- [46] Самарский, А.А. Математическое моделирование: Идеи. Методы. Примеры / А.А. Самарский, А.П. Михайлов. — М.: Физматлит, 2001. — 320 с.
- [47] Ситник, С.М. Метод операторов преобразования для дифференциальных уравнений с операторами Бесселя: монография / С.М. Ситник, Э.Л. Шишкина. — М.: Физматлит, 2019. — 224 с.
- [48] Сьярле, Ф. Метод конечных элементов для эллиптических задач / Ф. Сьярле. — Москва, 1980. — 512 с.
- [49] Тарасова, Н.В. Онколитические вирусы в терапии глиом: учебное пособие / М.В. Тарасова, Н.В. Губанова, И.А. Разумов и др.; Новосибирский государственный университет. — Новосибирск: РИЦ НГУ, 2015. — 27 с.

- [50] Тихонов, А.Н. Об однородных разностных схемах / А.Н. Тихонов, А.А. Самарский // ДАН СССР. — 1958. — Т. 122 № 4. — С. 562–565.
- [51] Тихонов, А.Н. Уравнения математической физики / А.Н. Тихонов, А.А. Самарский. — М.: Издательство МГУ; Наука, 2004. — 798 с.
- [52] Форсайт, Дж. Численное решение систем линейных алгебраических уравнений / Дж. Форсайт, К. Молер. — М.: Мир, 1969. — 168 с.
- [53] Шишкина, Э.Л. Равенство для интерированных весовых сферических средних, порожденных обобщенным сдвигом: Материалы научной конференции «Герценовские чтения 2013» 15-20 апреля 2013 г. / Э.Л. Шишкина // Дифференциальные уравнения. — Санкт-Петербург: Издательство РГПУ им. А.И. Герцена, 2013. — С. 143–145.
- [54] Эмануэль, Н.М. Биофизика рака / Н.М. Эмануэль, Р.Е. Кавецкий, Б.Н. Тарусов, Е.П. Сидорик. — Киев: Наукова думка, 1976. — 295 с.
- [55] Anderson, A.R.A. Mathematical modelling of tumour invasion and metastasis / A.R.A. Anderson, M.A.J. Chaplain, E.L. Newman, R.J.C. Steele, A.M. Thompson // Journal of Theoretical Medicine. — 2000. — Vol. 21. — P. 129–151.
- [56] Anderson, A.R.A. A hybrid mathematical model of solid tumour invasion: the importance of cell adhesion / A.R.A. Anderson // Mathematical Medicine and Biology. — 2005. — Vol. 22(2). — P. 163–186.
- [57] Byrne, H. Modelling solid tumour growth using the theory of mixtures / H. Byrne, L. Preziosi // Mathematical Medicine and Biology. — 2003. — Vol. 20(4). — P. 341–366.
- [58] Breward, C.J. A multiphase model describing vascular tumour growth / C.J. Breward, H.M. Byrne, C.E. Lewis // Bulletin of Mathematical Biology. — 2003. — Vol. 65(4). — P. 609–640.
- [59] Bearer, E.L. Multiparameter computational modeling of tumor invasion / E.L. Bearer, J.S. Lowengrub, H.B. Frieboes, Y.L. Chuang, F. Jin, S.M. Wise, M. Ferrari, D.B. Agus, V. Cristini // Cancer Research. — 2009. — Vol. 69(10). — P. 4493–4501.

- [60] Clatz, O. Realistic simulation of the 3D growth of brain tumors in MR images coupling diffusion with biomechanical deformation / O. Clatz, M. Sermesant, P.Y. Bondiau, H. Delingette, S.K. Warfield, G. Malandain, N. Ayache // IEEE Transactions on Medical Imaging. — 2005. — Vol. 24, N 10. — P. 1334–1346.
- [61] Cristini, V. Multiscale Modeling of Cancer / V. Cristini, J. Lowengrub. — Cambridge: Cambridge University Press, 2010.
- [62] Courant, R. Variational methods for solution of problems of equilibrium and vibration / R. Courant // Bulletin of the American Mathematical Society. — 1943. — Vol. 49. — P. 1–13.
- [63] Deisboeck, T.S. Multiscale Cancer Modeling / T.S. Deisboeck, G. Stamatakos // Boca Raton: Chapman and Hall/CRC Press, 2010.
- [64] Drasdo, D. Coarse graining in simulated cell populations / D. Drasdo // American Chemical Society. — 2005. — Vol. 8, № 23. — P. 319–363.
- [65] Falco, J. In Silico Mathematical Modelling for Glioblastoma: A Critical Review and a Patient-Specific Case / J. Falco, A. Agosti, I.G. Vetrano, A. Bizzi, F. Restelli, M. Broggi, M. Schiariti, F. DiMeco, P. Ferroli, P. Ciarletta, F. Acerbi // Journal of Clinical Medicine. — 2021. — Vol. 10. — P. 2169.
- [66] Fisher, R.A. The wave of advance of advantageous genes / R.A. Fisher // The Annals of Human Genetics. — 1937. — Vol. 7. — P. 355–369.
- [67] Giatili, S.G. A detailed numerical treatment of the boundary conditions imposed by the skull on a diffusion–reaction model of glioma tumor growth. Clinical validation aspects / S.G. Giatili, G.S. Stamatakos // Applied and Computational Mathematics. — 2012. — № 218. — P. 8779–8799.
- [68] Gao, X. A multiscale model for hypoxia-induced avascular tumor growth. In Proceedings of the International Conference on Bioscience, Biochemistry and Bioinformatics (IPCBEE): 26–28 February 2011; Singapore / M. Tangney, S. Tabirca // Singapore: IACSIT Press. — 2011. — Vol. 5. — P. 53–58.
- [69] Gatenby, R.A. A reaction–diffusion model of cancer invasion / R.A. Gatenby, E.T. Gawlinski // Cancer Research. — 1996. — № 56. — P. 5745–5753.

- [70] Gerlee, P. A hybrid cellular automaton model of clonal evolution in cancer: The emergence of the glycolytic phenotype / P. Gerlee, A.R.A. Anderson // *Journal of Theoretical Biology*. — 2008. — № 250. — P. 705–722.
- [71] Greenspan, H.P. Models for the growth of a solid tumor by diffusion / H.P. Greenspan // *Studies in Applied Mathematics*. — 1972. — № 51. — P. 317–340.
- [72] Harpold, H.L.P. The evolution of mathematical modeling of glioma proliferation and invasion / H.L.P. Harpold, E.C. Alvord, K.R. Swanson // *Journal of Neuropathology and Experimental Neurology*. — 2007. — № 66. — P. 1–9.
- [73] Hatzikirou, H. Cellular automata as microscopic models of cell migration in heterogeneous environments / H. Hatzikirou, A. Deutsch // *Current Topics in Developmental Biology*. — 2008. — № 81. — P. 401–434.
- [74] Holdsworth, C.H. Adaptive IMRT using a multiobjective evolutionary algorithm integrated with a diffusion-invasion model of glioblastoma / C.H. Holdsworth, D. Corwin, R.D. Stewart, R. Rockne, A.D. Trister, K.R. Swanson, M. Phillips // *Physics in Medicine & Biology*. — 2012. — Vol. 57. — P. 8271–8273.
- [75] Hotelling, H. A mathematical theory of migration / H. Hotelling // *Environment and Planning A*. — 1978. — Vol. 10 № 11. — P.1223–1239.
- [76] Jeon, J. An off-lattice hybrid discrete-continuum model of tumor growth and invasion / V. Quaranta, P.T. Cummings // *Biophysical Journal*. — 2010. — Vol. 98. — P. 37–47.
- [77] Jiang, Y. A multiscale model for avascular tumor growth / Y. Jiang, J. Pjesivac-Grbovic, C. Cantrell, J.P. Freyer // *Biophysical Journal*. — 2005. — Vol. 89. — P. 3884–3894.
- [78] Kansal, A.R. Simulated brain tumor growth dynamics using a three-dimensional cellular automaton / A.R. Kansal, S. Torquato, G.I. Harsh, E.A. Chiocca, T.S. Deisboeck // *Journal of Theoretical Biology*. — 2000. — Vol. 203, № 4. — P. 367–382.

- [79] Kim, Y. A mathematical model for pattern formation of glioma cells outside the tumor spheroid core / Y. Kim, S. Lawler, M.O. Nowicki, E.A. Chiocca, A. Friedman // *Journal of Theoretical Biology*. — 2009. — № 260. — P. 359–371.
- [80] Kim, Y. A hybrid model for tumor spheroid growth In Vitro I: theoretical development and early results / Y. Kim, M.A. Stolarska // *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences*. — 2007. — № 17. — P. 1773–1798.
- [81] Kozusko, F. Combining Gompertzian growth and cell population dynamics / F. Kozusko, Z. Bajzer // *Mathematical Biosciences*. — 2003. — Vol. 185(2). — P. 153–167.
- [82] Kiran, K.L. Mathematical modelling of avascular tumour growth based on diffusion of nutrients and its validation / K.L Kiran, D. Jayachandran, S. Lakshminarayanan // *The Canadian Journal of Chemical Engineering*. — 2009. — Vol. 87. — P. 732–740.
- [83] Li, X. Nonlinear three-dimensional simulation of solid tumor growth / X. Li, V. Cristini, Q. Nie, J.S. Lowengrub // *Discrete and Continuous Dynamical Systems-Series B*. — 2007. — Vol. 7(3). — P. 581–604.
- [84] Leten, C. In vivo and ex vivo assessment of the blood brain barrier integrity in different glioblastoma animal models / C. Leten, T. Struys, T. Dresselaers, U. Himmelreichs // *Journal of Neuro-Oncology*. — 2014. — № 119. — P. 297–306.
- [85] Matus, P.P. Analysis of second order difference schemes on non-uniform grids for quasilinear parabolic equations / P.P. Matus, L.M. Hieu, L.G. Vulkov // *Journal of Computational and Applied Mathematics*. — 2017. — № 300. — P. 186–199.
- [86] Matus, P.P. Stability of Difference Schemes for Nonlinear Time-dependent Problems / P.P. Matus // *Computational Methods in Applied Mathematics*. — 2003. — Vol. 3. — P. 313–329.
- [87] Matus, P. Monotone schemes of a higher order of accuracy for differential problems with boundary conditions of the second and third kind / P. Matus // *Computational Methods in Applied Mathematics*. — 2002. — № 2(4). — P. 378–391.

- [88] Mallet, D.G. A cellular automata model of tumor-immune system interactions / D.G. Mallet, L.G.D. Pillis // *Journal of Theoretical Biology*. — 2006. — № 239(3). — P. 334–350.
- [89] Martinez-Gonzalez, A. Hypoxic cell waves around necrotic cores in glioblastoma: a biomathematical model and its therapeutic implications / A. Martinez-Gonzalez, G.F. Calvo, L.A.P. Romasanta, V.M. Perez-Garcia // *Bulletin of Mathematical Biology*. — 2012. — Vol. 74. — P. 2875–2896.
- [90] Martens, C. Deep Learning for Reaction-Diffusion Glioma Growth Modeling: Towards a Fully Personalized Model / C. Martens, A. Rovai, D. Bonatto, T. Metens, O. Debeir, C. Decaestecker, S. Goldman, G. Van Simaey // *Cancers (Basel)*. — 2022. — Vol. 14, N 10. — P. 2530.
- [91] May, C. Coupling biomechanics to a cellular level model: an approach to patient-specific image driven multi-scale and multi-physics tumor simulation / C. May, E. Kolokotroni, G. Stamatakos, S.P. Buechler // *Progress in Biophysics and Molecular Biology*. — 2011. — № 107. — P. 193–199.
- [92] Nema, S. FEM Based study of concentration of proliferating cell in brain tumor / S. Nema, V.P. Saxena // *Applied mathematics*. — 2012. — Vol. 3. — P. 935–942.
- [93] Owen, L.N. The growth and cell population kinetics of spontaneous tumours in domestic animals / L.N. Owen, G.G. Steel // *British Journal of Cancer*. — 1969. — № 23. — P. 493–509.
- [94] Papadogiorgaki, M. Mathematical modelling of spatio-temporal glioma evolution / M. Papadogiorgaki, P. Koliou, X. Kotsiakis, M.E. Zervakis // *Theoretical Biology and Medical Modelling*. — 2013. — № 10(47). — P. 1–31.
- [95] Pao, C.V. *Nonlinear Parabolic and Elliptic Equations* / C.V. Pao. — New York and London: Plenum Press, 1992. — 785 p.
- [96] Perfahl, H. Multiscale modelling of vascular tumour growth in 3D: the roles of domain size and boundary conditions / H. Perfahl, H.M. Byrne, T. Chen,

- V. Estrella, T. Alarcon, A. Lapin, R.A. Gatenby, R.J. Gillies, M.C. Lloyd, P.K. Maini, M. Reuss, M.R. Owen // *PloS One* 2011. — № 6(4): e14790.
- [97] Preziosi, L. *Cancer Modelling and Simulation* / L. Preziosi. — Boca Raton: Chapman and Hall/CRC Press, 2003.
- [98] Ribba, B. The use of hybrid cellular automation models for improving cancer therapy / B. Ribba, T. Alcon, K. Marron, P.K. Maini, Z. Agur // *Lecture Notes in Computer Science* Lecture Notes in Computer Science. — 2004. — Vol. 3305. — P. 444–453.
- [99] Rejniak, K.A. Hybrid models of tumor growth / K.A. Rejniak, A.R. Anderson // *Wiley Interdisciplinary Reviews: Systems Biology and Medicine*. — 2010. — № 3. — P. 115–125.
- [100] Roniotis, A. A complete mathematical study of a 3D model of heterogeneous and anisotropic glioma evolution / A. Roniotis, K. Marias, V. Sakkalis, G.D. Tsihidis, M. Zervakis // *In Proceedings of the 31st Annual International Conference of the IEEE Engineering in Medicine and Biology Society: 2–6 September 2009; Minneapolis; Minnesota; USA* — New York: IEEE. — 2009. — P. 2807–2810.
- [101] Roniotis, A. High grade glioma diffusive modelling using statistical tissue information and diffusion tensors extracted from atlases / A. Roniotis, G. Manikis, V. Sakkalis, M. Zervakis, I. Karatzanis, K. Marias // *IEEE Transactions on Information Technology in Biomedicine*. — 2012. — Vol. 16, N 2. — P. 255–263.
- [102] Roos, T. Mathematical models of avascular tumor growth / T. Roos, S.J. Chapman, P.K. Maini // *Society for Industrial and Applied Mathematics*. — 2007. — Vol. 49, N 2. — P. 179–208.
- [103] Stein, A. M. A mathematical model of glioblastoma tumor spheroid invasion in a three-dimensional In Vitro experiment / A.M. Stein, T. Demuth, D. Mobley, L.M. Berens, K. Sander // *Biophysical Journal*. — 2007. — Vol. 92. — P. 356–365.

- [104] Szeto, M.D. Quantitative metrics of net proliferation and invasion link biological aggressiveness assessed by MRI with hypoxia assessed by FMISO-PET in newly diagnosed glioblastomas / M.D. Szeto, G. Chakraborty, J. Hadley // *Cancer Research*. — 2009. — Vol.9, N 10. — P. 4502–4509.
- [105] Swanson, K.R. Velocity of Radial Expansion of Contrast-enhancing Gliomas and the Effectiveness of Radiotherapy in Individual Patients: a Proof of Principle / K.R. Swanson, H.L.P. Harpold, D.L. Peacock, R. Rockne, C. Pennington, L. Kilbridey, R. Granty, J.M. Wardlawy, E.C. Alvord Jr // *Clinical Oncology*. — 2008. — Vol. 20. — P. 301–308.
- [106] Swanson, K.R. A mathematical modelling tool for predicting survival of individual patients following resection of glioblastoma: a proof of principle / K.R. Swanson, R.C. Rostomily, E.C. Alvord Jr // *British Journal of Cancer*. — 2008. — Vol. 98. — P. 113–119.
- [107] Swanson, K.R. Quantifying the role of angiogenesis in malignant progression of gliomas / K.R. Swanson, R.C. Rockne, J. Claridge, M.A. Chaplain, Jr.E.C. Alvord, A.R.A. Anderson // *Cancer Research*. — 2011. — V. 71, N 24. — P. 7366–7375.
- [108] Swanson, K.R. Virtual and real brain tumors: using mathematical modeling to quantify glioma growth and invasion / K.R. Swanson, C. Bridgea, J.D. Murray, E.C. Alvord // *Journal of the Neurological Sciences*. — 2003. — Vol. 216. — P. 1–10.
- [109] Tanaka, M.L. Hybrid mathematical model of glioma progression / M.L. Tanaka, W. Debinski, I.K. Puri // *Journal of the Royal Society Interface*. — 2009. — № 42. — P. 637–646.
- [110] Tracqui, P. A mathematical model of glioma growth: The effect of chemotherapy on spatio-temporal growth / P. Tracqui, G.C. Cruywagen, D.E. Woodward, G.T. Bartoo, J.D. Murray, E.C. Alvord // *Theoretical Biology and Medical Modelling*. — 1995. — Vol. 28. — P. 17–31.
- [111] Барабаш, О.П. Численный метод решения уравнения «реакция-диффузия» / О.П. Барабаш // *Прикладная математика & Физика*. — 2025. — Т. 57 № 1. — С. 52–58.

- [112] Barabash, O.P. On a difference scheme for the Growth-Propagation Equation / O.P. Barabash, M.V. Polovinkina, I.P. Polovinkin, M.L. Zhadanova // Lobachevskii journal of mathematics. — 2023. — Vol. 44 № 3. — P. 989–992.
- [113] Barabash, O.P. A discrete model of glioma growth and spread / O.P. Barabash, I.P. Polovinkin // Computational Mathematics Modeling. — 2025.
- [114] Барабаш, О.П. Применение проекционно–сеточного метода для решения нестационарной задачи / О.П. Барабаш // Международный научно–исследовательский журнал. — 2023. — № 11(137).
- [115] Барабаш, О.П. Об одном способе дискретизации задачи Фишера–Колмогорова–Петровского–Пискунова / О.П. Барабаш // Международный научно–исследовательский журнал. — 2025. — № 5(155).
- [116] Барабаш, О.П. Некоторые особенности реализации метода конечных элементов для сингулярного дифференциального уравнения / О.П. Барабаш // Вестник Воронежского государственного университета. Серия Физика. Математика. — 2023. — № 2. — С. 27–35.
- [117] Сумин, В.И. Разработка модели функционирования сложных субстанций на основе диффузионно-логистического уравнения / В.И. Сумин, О.П. Барабаш, И.П. Половинкин // Вестник Воронежского института ФСИИ России. — 2023. — № 1. — С. 138–143.
- [118] Барабаш, О.П. Об одном подходе к сильному решению В-эллиптической краевой задачи и его разностном приближении / О.П. Барабаш // Итоги науки и техн. Современ. мат. и ее прил. Темат. обз. Часть 2: Материалы Воронежской международной весенней математической школы «Современные методы краевых задач. Понтрягинские чтения—XXXV», Воронеж, 26-30 апреля, 2024 г. — Воронеж, 2024. — С. 3–12.
- [119] Барабаш, О.П. Об одной схеме для диффузионно-логистического уравнения / О.П. Барабаш // Математическое моделирование, программирование и прикладная математика: IV Международная научно–практическая конференция, Великий Новгород, 7-8 ноября, 2022 г. — Великий Новгород, 2023. — С. 6–7.

- [120] Барабаш, О.П. Разностная схема для диффузионно-логистического уравнения / О.П. Барабаш // Актуальные проблемы прикладной математики, информатики и механики: материалы Международной научной конференции, Воронеж, 12-14 декабря, 2022 г. — Воронеж: издательский дом ВГУ, 2023. — С. 325–328.
- [121] Барабаш, О.П. Об одной разностной схеме для диффузионно-логистического уравнения / О.П. Барабаш // Современные методы теории функций и смежные проблемы: материалы Международной конференции: Воронежская зимняя математическая школа (27 января-1 февраля 2023г.) / Воронежский государственный университет; Московский государственный университет им М.В. Ломоносова; Математический институт им В.А. Стеклова РАН. — Воронеж: издательский дом ВГУ, 2023. — С. 43–45.
- [122] Барабаш, О.П. О разностных методах сингулярных краевых задач / О.П. Барабаш // Современные методы теории функций и смежные проблемы: материалы Международной конференции: Воронежская зимняя математическая школа (30 января-4 февраля 2025г.) / Воронежский государственный университет; Московский государственный университет им М.В. Ломоносова; Математический институт им В.А. Стеклова РАН. — Воронеж: издательский дом ВГУ, 2025. — С. 65–67.
- [123] Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ 2024663009 Российская Федерация. Численное решение начально-краевой задачи для одномерного квазилинейного уравнения реакции-диффузии / О.П. Барабаш; заявитель и правообладатель Барабаш О.П.— № 2024661715/69; заявление 21.05.2024; опубл. 03.06.2024.
- [124] Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ 2024689152 Российская Федерация. Программа численного расчета для сингулярного нелинейного уравнения реакции-диффузии / О.П. Барабаш; заявитель и правообладатель Барабаш О.П. — № 2024687972/69; заявление 21.11.2024; опубл. 04.12.2024.

Приложение. Свидетельства о регистрации программ для ЭВМ

РОССИЙСКАЯ ФЕДЕРАЦИЯ



СВИДЕТЕЛЬСТВО

о государственной регистрации программы для ЭВМ

№ 2024663009

Численное решение начально-краевой задачи для
одномерного квазилинейного уравнения реакции-
диффузии

Правообладатель: *Барабаш Ольга Павловна (RU)*

Автор(ы): *Барабаш Ольга Павловна (RU)*



Заявка № 2024661715
Дата поступления 21 мая 2024 г.
Дата государственной регистрации
в Реестре программ для ЭВМ 03 июня 2024 г.

Руководитель Федеральной службы
по интеллектуальной собственности

ДОКУМЕНТ ПОДПИСАН ЭЛЕКТРОННОЙ ПОДПИСЬЮ
Сертификат 427965098385316454969683673564a87
Владелец: *Зубов Юлий Сергеевич*
Действителен с 18.02.2023 по 02.08.2024

Ю.С. Зубов

РОССИЙСКАЯ ФЕДЕРАЦИЯ



СВИДЕТЕЛЬСТВО

о государственной регистрации программы для ЭВМ

№ 2024689152

**Программа численного расчета для сингулярного
нелинейного уравнения реакции-диффузии**

Правообладатель: *Барабаш Ольга Павловна (RU)*

Автор(ы): *Барабаш Ольга Павловна (RU)*



Заявка № 2024687972

Дата поступления **21 ноября 2024 г.**

Дата государственной регистрации

в Реестре программ для ЭВМ **04 декабря 2024 г.**

*Руководитель Федеральной службы
по интеллектуальной собственности*

ДОКУМЕНТ ПОДПИСАН ЭЛЕКТРОННОЙ ПОДПИСЬЮ
Сертификат: 0469267c50e310c5b15424c1670f0cc2026
Владелец: **Зубов Юлий Сергеевич**
Действителен с 14.07.2024 по 03.10.2025

Ю.С. Зубов