Журнал обчисл. прикл. матем.
Вип. 1, 2000, стор. 61–75

J. Comput. Appl. Math.
No. 85, 2000, pp. 61–75

ТЕОРЕТИЧНЕ ТА ЧИСЕЛЬНЕ ДОСЛІДЖЕННЯ ЗАДАЧ ТЕПЛОПЕРЕНОСУ В БІОСЕНСОРНИХ СИСТЕМАХ

УДК 519.711

В. МАКАРОВ, Н. РОССОХАТА, В. РОССОХАТИЙ ТА І. ГАВРИЛЮК

Резюме. В роботі досліджується математична модель термобіосенсора, яка описується параболічною задачею трансмісії для одновимірного рівняння теплопровідності з функцією джерела, яка визначається розв'язком системи нелінійних рівнянь параболічного типу. Доведено існування та єдиність розв'язку задачі. Використовуючи метод скінчених різниць для дискретизації просторової змінної та перетворення Келлі, запропоновано алгоритм без насичення точності по часу для знаходження чисельного розв'язку, отримані оцінки швидкості збіжності наближеного розв'язку до точного.

1. Вступ

Дослідженню процесів теплопереносу в різних фізичних системах, причому як аналітичними, так і чисельними методами, приділялась значна увага як у вітчизняній, так і зарубіжній літературі [1, 2, 3, 4]. Однак ця задача залишається актуальною і сьогодні, оскільки продовжує знаходити нові області застосування. Однією з них є біосенсорні технології, мета яких полягає в розробці недорогих та надійних чутливих приладів для потреб медицини, охорони навколишнього середовища і т.і. [5, 6, 7, 8, 9]. Дія таких приладів базується, зокрема, на реєстрації температурних змін в результаті біохімічних реакцій. Саме тому дана робота присвячена теоретичному дослідженню математичної моделі термобіосенсора, запропонованої в роботі [9], та розробці ефективного чисельного алгоритму для знаходження наближеного розв'язку.

З математичної точки зору модель описується задачею трансмісії для одновимірного рівняння теплопровідності з функцією джерела, яка визначається розв'язком системи нелінійних рівнянь параболічного типу. Отже, розглянемо рівняння:

$$\rho_i C_i \frac{\partial u_i}{\partial t} = \lambda_i \frac{\partial^2 u_i}{\partial x^2} + F_i(x,t), \qquad x \in \left(x^{(i-1)}, x^{(i)}\right), \ i = 1,2,3, \ t \in (0,T], \tag{1}$$

з граничними умовами

$$u_1(0,t) = T_{amb} + (T_b - T_{amb})\left[1 - \exp(-t/\Delta_T)\right], \tag{2}$$

$$u_3(1,t) = T_{amb} - \frac{\lambda_3}{k_3^T} \frac{\partial u_3}{\partial x}\bigg|_{x=1}, \tag{3}$$

умовами зшивки:

$$\left[\lambda \frac{\partial u}{\partial x}\bigg|_{x^{(l)}}\right] = 0, \qquad l = 1,2, \tag{4}$$

$$\frac{\lambda_j}{k_j^T} \frac{\partial u_l}{\partial x}\bigg|_{x^{(l)}} = [u(x^{(l)}, t)], \qquad j = l, l+1, \ l = 1,2, \tag{5}$$

та початковою умовою:

$$u_i(x,0) = T_{amb}, \qquad i = 1,2,3. \tag{6}$$

Тут $x^{(0)} = 0$, $x^{(3)} = 1$ і $[f(x^{(l)})] = f_{l+1}(x^{(l)}) - f_l(x^{(l)})$ стрибок функції f в точці $x^{(l)}$.

Потужність джерела $F(x,t)$ лінійно залежить від швидкості ферментної реакції $v(x,t)$, яка задовольняє кінетиці Міхаеліса–Ментена:

$$F_1(x,t) = Q \cdot v(S_1, S_2) = Q \cdot v_{\max} \frac{S_1 S_2}{K_1^M S_2 + K_2^M S_1 + S_1 S_2}, \tag{7}$$

$$F_2(x,t) = F_3(x,t) \equiv 0.$$

$S_i(x,t)$, $i = 1,2$, визначаються як розв'язок системи нелінійних рівнянь в частинних похідних:

$$\frac{\partial S_i}{\partial t} = D_i \frac{\partial^2 S_i}{\partial x^2} + \alpha_i \cdot v(S_1, S_2), \qquad x \in (0, x^{(1)}),\ t \in (0,T),\ i = 1,2, \tag{8}$$

з граничними умовами:

$$S_i(0,t) = S_i^0 + \left(S_i^b - S_i^0\right)\left[1 - \exp(-t/\Delta_S)\right] + \frac{D_i}{k_i^S} \frac{\partial S_i}{\partial x}\bigg|_0, \tag{9}$$

$$\frac{\partial S_i}{\partial x}\bigg|_{x^{(1)}} = 0 \tag{10}$$

та початковою умовою:

$$S_i(x,0) = S_i^0. \tag{11}$$

Тут ρ_i, C_i, λ_i, $i = 1,2,3$, — питома густина, питома теплоємність та коефіцієнт теплопровідності матеріалу мембрани, відповідно, T_{amb} — початкова температура сенсора, T_b — температура буфера, Δ_T — постійна часу для температури, k_l^T, $l = 1,2,3$, — коефіцієнт теплопереносу, $S_i(x,t)$, $i = 1,2$, — концентрація компонент, $v_{\max}$ — максимальна швидкість реакції, Q — тепловий вихід реакції, K_i^M, $i = 1,2$, — постійні Міхаеліса, α_i, $i = 1,2$, — коефіцієнти, що відображають стехіометрію біохімічної реакції, S_i^0, S_i^b, $i = 1,2$, — концентрації компонент в мембрані та в буферному розчині, відповідно, Δ_S — постійна часу для концентрації компонент в мембрані.

Питанням аналітичного дослідження задач трансмісії та побудови обчислювальних алгоритмів для знаходження їх розв'язку присвячені роботи [3, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16]. Варто зазначити, що для знаходження чисельного розв'язку по часу, як правило, використовуються покрокові методи, недоліком яких є накопичення похибки на кроці. В даній роботі для знаходження наближеного розв'язку параболічної задачі трансмісії застосовано алгоритм, що не містить вказаного недоліку. Він належить до класу, так званих, методів без насичення точності по часу і вперше був запропонований і досліджений в роботах [17, 18, 19, 20, 21, 22]. Однією з його переваг є те, що на відміну від покрокових методів він дозволяє знаходити наближений розв'язок задачі в будь-який момент часу, не використовуючи при цьому розв'язків в попередні моменти часу. Ще однією перевагою є автоматична адаптація швидкості збіжності до гладкості початкових даних задачі.

Робота побудована наступним чином. Спочатку доводиться існування та єдиність розв'зку задачі (1)–(11). Оскільки існування та єдиність розв'зку доведено в просторі $C^{2,1}(Q_T^1) \cap C^{1,0}(\overline{Q_T^1})$, то для дискретизації просторової змінної використано метод скінчених різниць. Таким чином, побудована схема методу прямих, яка має перший порядок точності по просторовій змінній. Для чисельної реалізації схеми методу прямих запропоновано метод без насичення точності по часу, що базується на перетворенні Келлі [17, 18, 19, 20, 21, 22], отримані оцінки швидкості збіжності наближеного розв'язку до точного, оцінено кількість членів ряду, достатню для забезпечення швидкості збіжності по часу такого ж порядку, як і по простору.

2. Існування та єдиність розв'язку

Нехай $Q_T^i = (x^{(i-1)}, x^{(i)}) \times (0,T]$. Через $C^{2m,m}(Q_T^i)$ і $H^{2+\beta,1+\beta/2}(Q_T^i)$ позначимо функціональні простори в сенсі роботи [23]. Результат про існування та єдиність розв'язку задачі (1)–(11) сформулюємо у вигляді теорем.

Теорема 1. *Нехай* $D_i > 0$, $\alpha_i > 0$, $S_i^0 > 0$, $S_i^b > 0$, $K_i^M > 0$, $k_i^s > 0$, $i = 1, 2$. *Тоді в просторі* $C^{2,1}(Q_T^1) \cap C^{1,0}(\overline{Q_T^1})$ *існує єдиний розв'язок* $S_i(x,t)$, $i = 1, 2$, *задачі (8)–(11) такий, що*

$$0 \le S_i(x,t) \le \max\left\{S_i^0, S_i^b\right\}. \tag{12}$$

Мішана похідна $\partial^2 S_i/\partial t \partial x$ *належить просторові* $L_2(Q_T^1)$.

Доведення. Розглянемо задачу (8)–(11) для кожного i, $i = 1, 2$, окремо, вважаючи що S_{3-i} — параметр. Спираючись на результати про існування та єдиність класичного розв'язку початково-крайових задач для квазілінійних параболічних рівнянь [23, с. 513, 682], приходимо до висновку, що існує єдиний розв'язок $S_i(x,t)$ задачі (8)–(11) в просторі $H^{2+\beta,1+\beta/2}(\overline{Q_T^1})$, $0 < \beta < 1$, і його мішана похідна $\partial^2 S_i/\partial t \partial x$ належить просторові $L_2(Q_T^1)$. Далі, використовуючи принцип максимуму для нелінійних диференціальних рівнянь в частинних похідних [24, Теор. 17, с. 73], отримаємо нерівність (12). Теорема 1 доведена. □

Теорема 2. *Нехай всі фізичні сталі — додатні величини. Тоді в просторі*

$$\prod_{i=1}^{3} C^{2,1}(Q_T^i) \cap C^{1,0}(\overline{Q_T^i})$$

існує єдиний розв'зок $u(x,t) = (u_1(x,t), u_2(x,t), u_3(x,t))$ *задачі (1)–(6), і його мішана похідна* $\partial^2 u/\partial t \partial x$ *належить просторові* $\prod_{i=1}^{3} C^{1,0}(Q_T^i) \cap C(\overline{Q_T^i})$.

Доведення. Для доведення теореми використаємо метод теплових потенціалів [25]. Запишемо розв'язок задачі (1)–(6) $u = (u_1, u_2, u_3)$ у вигляді суми потенціалу подвійного шару та потенціалу простого шару на проміжку $(0, x^{(1)})$, та суми потенціалів простого шару на проміжках $(x^{(1)}, x^{(2)})$ та $(x^{(2)}, x^{(3)})$. Таким чином, розглянемо три взаємозв'язані початково-крайові задачі:

1)

$$\begin{gathered}
\frac{\partial}{\partial t}u_1(x,t) = a_1^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}u_1(x,t) + F_1(x,t), \qquad x \in \left(0, x^{(1)}\right), \ t \in (0,T], \\
u_1(0,t) = \varphi_0(t) = T_{amb} + (T_b - T_{amb})\left[1 - \exp(-t/\Delta_T)\right], \\
\frac{\partial}{\partial x}u_1\left(x^{(1)}, t\right) = \varphi_1(t), \\
u_1(x,0) = T_{amb};
\end{gathered} \tag{13}$$

2)

$$\begin{gathered}
\frac{\partial}{\partial t}u_2(x,t) = a_2^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}u_2(x,t), \qquad x \in \left(x^{(1)}, x^{(2)}\right), \ t \in (0,T], \\
\frac{\partial}{\partial x}u_2\left(x^{(1)}, t\right) = \frac{\lambda_1}{\lambda_2}\varphi_1(t), \\
\frac{\partial}{\partial x}u_2\left(x^{(2)}, t\right) = \varphi_2(t), \\
u_2(x,0) = T_{amb};
\end{gathered} \tag{14}$$

3)

$$\begin{gathered}
\frac{\partial}{\partial t}u_3(x,t) = a_3^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}u_3(x,t), \qquad x \in \left(x^{(2)}, 1\right), \ t \in (0,T], \\
\frac{\partial}{\partial x}u_3\left(x^{(2)}, t\right) = \frac{\lambda_2}{\lambda_3}\varphi_2(t), \\
\frac{\lambda_3}{k_3^T}\frac{\partial}{\partial x}u_3(1,t) + u_3(1,t) = T_{amb}, \\
u_3(x,0) = T_{amb}.
\end{gathered} \tag{15}$$

Тут $a_i = \sqrt{\lambda_i/\rho_i C_i}$, $i = 1, 2, 3$, φ_1 та φ_2 вважаємо невідомими.

Розв'язки задач (13), (14), (15), відповідно, можна представити у вигляді:

$$u_1(x,t) = a_1^2 \int_0^t \left[\vartheta_1(0,\tau)\mu_1(x,0,t-\tau) + \sigma_1(x^{(1)},\tau)\delta_1(x,x^{(1)},t-\tau)\right] d\tau$$

$$+ T_{amb} \int_0^{x^{(1)}} \delta_1(x,\xi,t)\, d\xi + \int_0^t \int_0^{x^{(1)}} F_1(\xi,\tau)\delta_1(x,\xi,t-\tau)\, d\xi\, d\tau,$$

$$u_i(x,t) = a_i^2 \int_0^t \left[\sigma_i(x^{(i-1)},\tau)\delta_i(x,x^{(i-1)},t-\tau) + \sigma_i(x^{(i)},\tau)\delta_i(x,x^{(i)},t-\tau)\right] d\tau$$

$$+ T_{amb} \int_{x^{(i-1)}}^{x^{(i)}} \delta_i(x,\xi,t)\, d\xi, \qquad i = 2,3.$$

Тут

$$\delta_i(x,\xi,t) = \frac{1}{2a_i\sqrt{\pi t}} \exp\left\{-\frac{(x-\xi)^2}{4a_i^2 t}\right\},$$

$$\mu_i(x,\xi,t) = \frac{\partial}{\partial x}\delta_i(x,\xi,t) = \frac{(x-\xi)}{2a_i^2 t}\delta_i(x,\xi,t), \qquad i = 1,2,3.$$

Невідомі функції $\vartheta_1(0,\tau)$, $\sigma_i(x^{(i-1)},\tau)$ та $\sigma_i(x^{(i)},\tau)$ знаходимо з граничних умов (2), (3) та умов зшивки (4), (5). В результаті перетворень отримаємо наступну систему рівнянь Вольтерра другого типу

$$\sigma(t) = \int_0^t K(t,\tau)\sigma(\tau)\, d\tau + f(t). \tag{16}$$

Тут

$$\sigma(t) = \begin{pmatrix} \vartheta^{(1)}(0,t) \\ \sigma_1(x^{(1)},t) \\ \sigma_2(x^{(1)},t) \\ \sigma_2(x^{(2)},t) \\ \sigma_3(x^{(2)},t) \\ \sigma_3(x^{(3)},t) \end{pmatrix},$$

$$K(t,\tau) = \begin{pmatrix} 0 & K_{12}(t,\tau) & 0 & 0 & 0 & 0 \\ K_{21}(t,\tau) & K_{22}(t,\tau) & K_{23}(t,\tau) & K_{24}(t,\tau) & 0 & 0 \\ K_{31}(t,\tau) & K_{32}(t,\tau) & K_{33}(t,\tau) & K_{34}(t,\tau) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & K_{43}(t,\tau) & K_{44}(t,\tau) & K_{45}(t,\tau) & K_{46}(t,\tau) \\ 0 & 0 & K_{53}(t,\tau) & K_{54}(t,\tau) & K_{55}(t,\tau) & K_{56}(t,\tau) \\ 0 & 0 & 0 & 0 & K_{65}(t,\tau) & K_{66}(t,\tau) \end{pmatrix},$$

де

$$K_{12}(t,\tau) = 2a_1^2\delta_1\left(0,x^{(1)},t-\tau\right),$$

$$K_{21}(t,\tau) = 2a_1^2\left(\frac{\partial}{\partial x}\mu_1\left(x^{(1)},0,t-\tau\right) + \frac{k_1^T}{\lambda_1}\mu_1\left(x^{(1)},0,t-\tau\right)\right),$$

$$K_{22}(t,\tau) = \frac{k_1^T}{\lambda_1}\frac{a_1}{\sqrt{\pi(t-\tau)}},$$

$$K_{23}(t,\tau) = -\frac{k_1^T}{\lambda_1}\frac{a_2}{\sqrt{\pi(t-\tau)}},$$

$$K_{24}(t,\tau) = -2\frac{k_1^T}{\lambda_1}a_2^2\delta_2\left(x^{(1)},x^{(2)},t-\tau\right),$$

$$K_{31}(t,\tau) = 2a_1^2\frac{k_1^T}{\lambda_2}\mu_1\left(x^{(1)},0,t-\tau\right),$$

$$K_{32}(t,\tau) = \frac{k_1^T}{\lambda_2}\frac{a_1}{\sqrt{\pi(t-\tau)}},$$

$$K_{33}(t,\tau) = -\frac{k_1^T}{\lambda_2}\frac{a_2}{\sqrt{\pi(t-\tau)}},$$

$$K_{34}(t,\tau) = 2a_2^2\left(\mu_2\left(x^{(1)},x^{(2)},t-\tau\right) - \frac{k_1^T}{\lambda_2}\delta_2\left(x^{(1)},x^{(2)},t-\tau\right)\right),$$

$$K_{43}(t,\tau) = 2a_2^2\left(\mu_2\left(x^{(2)},x^{(1)},t-\tau\right) + \frac{k_2^T}{\lambda_2}\delta_2\left(x^{(2)},x^{(1)},t-\tau\right)\right),$$

$$K_{44}(t,\tau) = \frac{k_2^T}{\lambda_2}\frac{a_2}{\sqrt{\pi(t-\tau)}},$$

$$K_{45}(t,\tau) = -\frac{k_2^T}{\lambda_2}\frac{a_3}{\sqrt{\pi(t-\tau)}},$$

$$K_{46}(t,\tau) = -2\frac{k_2^T}{\lambda_2}a_3^2\delta_3\left(x^{(2)},1,t-\tau\right),$$

$$K_{53}(t,\tau) = 2a_2^2\frac{k_2^T}{\lambda_3}\delta_2\left(x^{(2)},x^{(1)},0,t-\tau\right),$$

$$K_{54}(t,\tau) = \frac{k_2^T}{\lambda_3}\frac{a_2}{\sqrt{\pi(t-\tau)}},$$

$$K_{55}(t,\tau) = -\frac{k_2^T}{\lambda_3}\frac{a_3}{\sqrt{\pi(t-\tau)}},$$

$$K_{56}(t,\tau) = 2a_3^2\left(\mu_3\left(x^{(2)},1,t-\tau\right) - \frac{k_2^T}{\lambda_3}\delta_3\left(x^{(2)},1,t-\tau\right)\right),$$

$$K_{65}(t,\tau) = 2a_3^2\left(\mu_3\left(1,x^{(2)},t-\tau\right) - \frac{k_3^T}{\lambda_3}\delta_3\left(1,x^{(2)},t-\tau\right)\right),$$

$$K_{66}(t,\tau) = \frac{a_3}{\sqrt{\pi(t-\tau)}},$$

$$f_1(t) = \varphi_0(t) - T_{amb}\int_0^{x^{(1)}}\delta_1(0,\xi,t)\,d\xi - \int_0^t\int_0^{x^{(1)}}F_1(\xi,\tau)\delta_1(0,\xi,t-\tau)\,d\xi\,d\tau,$$

$$\begin{aligned} f_2(t) = &-\int_0^t\int_0^{x^{(1)}}F_1(\xi,\tau)\left(\mu_1\left(x^{(1)},\xi,t-\tau\right) + \frac{k_1^T}{\lambda_1}\delta_1\left(x^{(1)},\xi,t-\tau\right)\right)d\xi\,d\tau \\ &- T_{amb}\int_0^{x^{(1)}}\left(\mu_1\left(x^{(1)},\xi,t\right) - \frac{k_1^T}{\lambda_1}\delta_1\left(x^{(1)},\xi,t\right)\right)d\xi \\ &+ \frac{k_1^T T_{amb}}{\lambda_2}\int_{x^{(1)}}^{x^{(2)}}\delta_2\left(x^{(1)},\xi,t\right)d\xi, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} f_3(t) = &\frac{k_1^T}{\lambda_2}\int_0^t\int_0^{x^{(1)}}F_1(\xi,\tau)\delta_1\left(x^{(1)},\xi,t-\tau\right)d\xi\,d\tau \\ &+ \frac{k_1^T T_{amb}}{\lambda_2}\int_0^{x^{(1)}}\delta_1\left(x^{(1)},\xi,t\right)d\xi \\ &+ T_{amb}\int_{x^{(1)}}^{x^{(2)}}\left(\mu_2\left(x^{(1)},\xi,t\right) - \frac{k_1^T}{\lambda_2}\delta_2\left(x^{(1)},\xi,t\right)\right)d\xi, \end{aligned}$$

$$f_4(t) = -T_{amb}\int_{x^{(1)}}^{x^{(2)}}\left(\mu_2\left(x^{(2)},\xi,t\right) - \frac{k_2^T}{\lambda_2}\delta_2\left(x^{(2)},\xi,t\right)\right)d\xi + \frac{k_2^T T_{amb}}{\lambda_3}\int_{x^{(2)}}^{1}\delta_3\left(x^{(2)},\xi,t\right)d\xi,$$

$$f_5(t) = \frac{k_2^T T_{amb}}{\lambda_3}\int_{x^{(1)}}^{x^{(2)}}\delta_2\left(x^{(2)},\xi,t\right)d\xi + T_{amb}\int_{x^{(2)}}^{1}\left(\mu_3\left(x^{(2)},\xi,t\right) - \frac{k_2^T}{\lambda_3}\delta_3\left(x^{(2)},\xi,t\right)\right)d\xi,$$

$$f_6(t) = -\frac{k_3^T T_{amb}}{\lambda_3} - T_{amb}\int_{x^{(2)}}^{1}\left(\mu_3(1,\xi,t) - \frac{k_3^T}{\lambda_3}\delta_3(1,\xi,t)\right)d\xi.$$

Згідно [26, с. 20] існує єдиний розв'язок задачі (16), де $\sigma_i(t)$, $i = 1,\dots,6$, неперервні функції. Отже, приходимо до висновку, що існує єдиний розв'язок задачі (1)–(6) в просторі $\prod_{i=1}^{3} C^{2,1}(Q_T^i) \cap C^{1,0}(\overline{Q_T^i})$.

Покажемо, що $\partial^2 u/\partial x\partial t \in \prod_i C^{1,0}(Q_T^i) \cap C(\overline{Q_T^i})$. Позначимо $v = \partial u/\partial t$ і розглянемо параболічну задачу трансмісії:

$$\rho_i C_i\frac{\partial v_i}{\partial t} = \lambda_i\frac{\partial^2 v_i}{\partial x^2} + \frac{\partial}{\partial t}F_i(x,t), \qquad x \in \left(x^{(i-1)},x^{(i)}\right),\ i = 1,2,3,\ t \in (0,T], \tag{17}$$

з граничними умовами:

$$v_1(0,t) = \frac{T_b - T_{amb}}{\Delta_T}\exp(-t/\Delta_T), \tag{18}$$

$$v_3(1,t) = -\frac{\lambda_3}{k_3^T}\frac{\partial v_3}{\partial x}\bigg|_{x=1}, \tag{19}$$

умовами зшивки:

$$\left[\lambda\frac{\partial v}{\partial x}\bigg|_{x^{(l)}}\right] = 0, \qquad l = 1,2, \tag{20}$$

$$\frac{\lambda_j}{k_j^T}\frac{\partial v_l}{\partial x}\bigg|_{x^{(l)}} = [v(x^{(l)},t)], \qquad j = l,l+1,\ l = 1,2 \tag{21}$$

та початковою умовою:

$$v_1(x,0) = \frac{Qv_{\max}}{\rho_1 C_1}\frac{S_1^0 S_2^0}{K_1^M S_2^0 + K_2^M S_1^) + S_1^0 S_2^0}, \tag{22}$$

$$v_2(x,0) = v_3(x,0) \equiv 0.$$

Неважко помітити, що для

$$F_1(x,t) = Q\cdot v(x,t) = Q\cdot v_{\max}\frac{S_1S_2}{K_1^M S_2 + K_2^M S_1 + S_1S_2} = Q\cdot v_{\max}\frac{1}{K_1^M/S_1 + K_2^M/S_2 + 1}$$

має місце

$$\left|\frac{\partial}{\partial t}F_1(x,t)\right| \le \frac{Q\cdot v_{\max}}{\min\{K_1^M,K_2^M\}}\left(\left|\frac{\partial S_1}{\partial t}\right| + \left|\frac{\partial S_2}{\partial t}\right|\right).$$

Оскільки $S_i \in C^{2,1}(Q_T^1)$, $i = 1,2$, то $\partial F_1(x,t)/\partial t \in C(Q_T^1)$.

Далі, розглянемо задачі (13), (14), (15) для $v = (v_1,v_2,v_3)$, де $v_i(x,0)$ визначається за формулою (22), $\partial F_1(x,t)/\partial t$ замість $F_1(x,t)$ і $d\varphi_0/dt$ замість φ_0 в (13), і права частина граничної умови в точці $x = 1$ задачі (15) дорівнює нулеві. Розв'язки цих задач можна записати у вигляді:

$$v_1(x,t) = a_1^2 \int_0^t \left[\vartheta_1(0,\tau)\mu_1(x,0,t-\tau) + \sigma_1\left(x^{(1)},\tau\right)\delta_1\left(x,x^{(1)},t-\tau\right)\right] d\tau$$
$$+ \int_0^{x^{(1)}} v_1(\xi,0)\delta_1(x,\xi,t)\,d\xi + \int_0^t\int_0^{x^{(1)}} \frac{\partial}{\partial\tau}F_1(\xi,\tau)\delta_1(x,\xi,t-\tau)\,d\xi\,d\tau,$$
$$v_i(x,t) = a_i^2 \int_0^t \left[\sigma_i\left(x^{(i-1)},\tau\right)\delta_i\left(x,x^{(i-1)},t-\tau\right) + \sigma_i\left(x^{(i)},\tau\right)\delta_i\left(x,x^{(i)},t-\tau\right)\right] d\tau,$$
$$i = 2,3.$$

Знаходячи невідомі функції $\vartheta_1(0,\tau)$, $\sigma_i(x^{(i-1)},\tau)$ та $\sigma_i(x^{(i)},\tau)$ з граничних умов (18), (19) та умов зшивки (20), (21), отримаємо систему

$$\sigma(t) = \int_0^t K(t,\tau)\sigma(\tau)\,d\tau + \tilde{f}(t). \tag{23}$$

Тут

$$\sigma(t) = \begin{pmatrix} \vartheta^{(1)}(0,t) \\ \sigma_1(x^{(1)},t) \\ \sigma_2(x^{(1)},t) \\ \sigma_2(x^{(2)},t) \\ \sigma_3(x^{(2)},t) \\ \sigma_3(x^{(3)},t) \end{pmatrix},$$

$K(t,\tau)$ визначається як і раніше, а $\tilde{f}(t)$ має вигляд:

$$\tilde{f}_1(t) = \frac{d}{dt}\varphi_0(t) - \int_0^{x^{(1)}} v_1(\xi,0)\delta_1(0,\xi,t)\,d\xi - \int_0^t\int_0^{x^{(1)}} \frac{\partial}{\partial\tau}F_1(\xi,\tau)\delta_1(0,\xi,t-\tau)\,d\xi\,d\tau,$$

$$\tilde{f}_2(t) = -\int_0^t\int_0^{x^{(1)}} \frac{\partial}{\partial\tau}F_1(\xi,\tau)\left(\mu_1\left(x^{(1)},\xi,t-\tau\right) + \frac{k_1^T}{\lambda_1}\delta_1\left(x^{(1)},\xi,t-\tau\right)\right) d\xi\,d\tau$$
$$- \int_0^{x^{(1)}} v_1(\xi,0)\left(\mu_1\left(x^{(1)},\xi,t\right) - \frac{k_1^T}{\lambda_1}\delta_1\left(x^{(1)},\xi,t\right)\right) d\xi,$$

$$\tilde{f}_3(t) = \frac{k_1^T}{\lambda_2}\int_0^t\int_0^{x^{(1)}} \frac{\partial}{\partial\tau}F_1(\xi,\tau)\delta_1\left(x^{(1)},\xi,t-\tau\right) d\xi\,d\tau + \frac{k_1^T}{\lambda_2}\int_0^{x^{(1)}} v_1(\xi,0)\delta_1\left(x^{(1)},\xi,t\right) d\xi,$$

$$\tilde{f}_i(t) = 0, \qquad i = 4,5,6.$$

Знову ж таки, згідно [26, с. 20] існує єдиний розв'язок задачі (23), де $\sigma_i(t)$, $i = \overline{1,6}$, — неперервні функції. Отже, приходимо до висновку, що існує єдиний розв'язок задачі (17)–(22) в просторі $\prod_{i=1}^3 C^{2,1}(Q_T^i) \cap C^{1,0}(\overline{Q_T^i})$. Таким чином, $\partial u/\partial t \in \prod_{i=1}^3 C^{2,1}(Q_T^i) \cap C^{1,0}(\overline{Q_T^i})$, тобто $\partial^2 u/\partial t\partial x \in \prod_{i=1}^3 C^{1,0}(Q_T^i) \cap C(\overline{Q_T^i})$. Це і завершує доведення Теореми 2. □

3. Схема методу прямих

Нехай $x^{(1)}$ та $x^{(2)}$ — раціональні числа. На кожному відрізку $[x^{(i-1)}, x^{(i)}]$, $i = 1,2,3$, введемо рівномірну сітку $\overline{\omega}^i = \{x_j^i = x^{(i-1)} + jh_i \colon j = 0,\dots,N_i, h_i = (x^{(i)} - x^{(i-1)})/N_i\}$. Позначимо $\omega_+^i = \overline{\omega}^i \setminus \{x_0^i\}$. Через H_h^i позначимо Гільбертів простір сіткових функцій на $\overline{\omega}^i$:

$$H_h^i = \left\{u_j^i = u_i(x_j^i) \colon j = 0,\dots,N_i\right\}, \qquad i = 1,2,3,$$

відповідно, $\dot{H}_h^i = \{u^i \in H_h^i \colon u_0^i = 0\}$, $i = 1,2,3$.

Розглянемо наступні скалярні добутки і відповідні їм норми:

$$[u,v]^{(i)} = \sum_{j=1}^{N_i-1} h_i u_j v_j + \frac{1}{2} h_i (u_0 v_0 + u_{N_i} v_{N_i}), \qquad \left(|[u]|^{(i)}\right)^2 = \sum_{j=1}^{N_i-1} h_i u_j^2 + \frac{1}{2} h_i \left(u_0^2 + u_{N_i}^2\right),$$

$$(u,v]_1^{(i)} = \sum_{j=1}^{N_i} h_i u_{j\bar{x}} v_{j\bar{x}}, \qquad \left(\|u]|^{(i)}\right)_1^2 = \sum_{j=1}^{N_i} h_i u_{j\bar{x}}^2, \qquad i = 1, 2, 3.$$

Далі, через $H_h = \prod_{i=1}^3 H_h^i$ позначимо гільбертів простір сіткових функцій на $\overline{\omega} = \prod_{i=1}^3 \overline{\omega^i}$. Введемо скалярні добутки і відповідні їм норми:

$$[u,v] = \sum_{i=1}^{3} \left[u^i, v^i\right]^{(i)}, \qquad |[u]|^2 = \sum_{i=1}^{3} \left(\left|\left[u^i\right]\right|^{(i)}\right)^2,$$

$$(u,v]_1 = \sum_{i=1}^{3} \left(u^i, v^i\right]_1^{(i)} + \sum_{i=1}^{2} k_i^T \left(u_0^{i+1} - u_{N_i}^i\right)\left(v_0^{i+1} - v_{N_i}^i\right),$$

$$\|u]|_1^2 = \sum_{i=1}^{3} \left(\|u^i]|_1^{(i)}\right)^2 + \sum_{i=1}^{2} k_i^T \left(u_0^{i+1} - u_{N_i}^i\right)^2.$$

Через $L_\infty(0,T;L_2(\overline{\omega}))$ та $L_2(0,T;H_h)$ позначимо простори функцій неперервних по часу і дискретних по просторовій змінній із скалярними добутками і нормами, відповідно:

$$(u,v)_{L_\infty(0,T;L_2(\overline{\omega}))} = \sup_{t\in(0,T]} [u(t), v(t)], \qquad \|u\|_{L_\infty(0,T;L_2(\overline{\omega}))} = \sup_{t\in(0,T]} |[u(t)]|,$$

$$(u,v)_{L_2(0,T;H_h)} = \int_0^T (u(t), v(t)]_1 \, dt, \qquad \|u\|_{L_2(0,T;H_h)} = \left(\int_0^T \|u(t)]|_1^2 \, dt\right)^{1/2}.$$

Розв'язок задачі (1)–(6) запишемо у виляді:

$$u(x,t) = \tilde{u}(x,t) + \Psi(x,t),$$

де

$$\Psi_i(x,t) = \begin{cases} \varphi_0(t) \frac{\left(x - x^{(1)}\right)^2}{\left[x^{(1)}\right]^2}, & i = 1; \\ 0, & i = 2; \\ \frac{T_{amb} k_3^T \left(x - x^{(2)}\right)^2}{\left(2\lambda_3 + k_3^T\left(1 - x^{(2)}\right)\right)\left(1 - x^{(2)}\right)}, & i = 3. \end{cases}$$

Для знаходження наближеного розв'язку побудуємо схему методу прямих:

$$\rho C \frac{dy(t)}{dt} + A_h y(t) = F(t), \tag{24}$$

$$y(0) = T_{amb} E - \Psi(0),$$

де $y(t) = (y^1(t), y^2(t), y^3(t))^T$, $y^1(t) = (y^1(x_1^1, t), y^1(x_2^1, t), \ldots, y^1(x_{N_1}^1, t))^T$, $y^i(t) = (y^i(x_0^i, t), y^i(x_1^i, t), \ldots, y^i(x_{N_i}^i, t))^T$, $i = 2, 3$; $A_h y(t) = (A_h y^1(t), A_h y^2(t), A_h y^3(t))^T$,

$$[A_h y^i(t)]_j = \begin{cases} -\lambda_i y_{j\bar{x}x}^i(t), & j = 1, \ldots, N_i - 1, \ i = 1, 2, 3; \\ -\lambda_i \frac{2}{h_i} \left[\frac{y_0^{i+1}(t) - y_{N_i}^i(t)}{\lambda_i / k_i^T} - y_{N_i\bar{x}}^i(t)\right], & j = N_i, \ i = 1, 2, \\ -\lambda_i \frac{2}{h_i} \left[y_{0x}^i(t) - \frac{y_0^i(t) - y_{N_{i-1}}^{i-1}(t)}{\lambda_i / k_{i-1}^T}\right], & j = 0, \ i = 2, 3, \\ -\lambda_3 \frac{2}{h_3} \left[\frac{-y_{N_3}^3(t)}{\lambda_3 / k_3^T} - y_{N_3\bar{x}}^3(t)\right], & j = N_3, \ i = 3, \end{cases} \tag{25}$$

$$F(t) = (F^1(t), F^2(t), F^3(t))^T,$$

$$[F^i(t)]_j = \begin{cases} Qv\left(V^1\left(x_j^1, t\right), V^2\left(x_j^1, t\right)\right) & \\ \quad +2\lambda_1\varphi_0(t)\frac{1}{\left[x^{(1)}\right]^2}\rho_1 C_1\varphi_0'(t)\frac{\left(x-x^{(1)}\right)^2}{\left[x^{(1)}\right]^2}, & j = 1, \ldots, N_1,\ i = 1, \\ 0, & j = 0, \ldots, N_2,\ i = 2, \\ 2\frac{T_{amb}\lambda_3 k_3^T}{\left(2\lambda_3 + k_3^T\left(1-x^{(2)}\right)\right)\left(1-x^{(2)}\right)}, & j = 0, \ldots, N_3,\ i = 3, \end{cases}$$

$\Psi(0) = (\Psi^1(0), \Psi^2(0), \Psi^3(0))^T$, $[\Psi^i(0)]_j = \Psi_i(x_j^i, 0)$, $j = 1, \ldots, N_1$, $i = 1$, $j = 0, \ldots, N_i$, $i = 2, 3$, E — одиничний вектор розмірності $N_1 + N_2 + N_3 + 2$.

Лема 1. *Оператор A_h — самоспряжений, додатньо визначений.*

Доведення. Оскільки

$$[A_h u, v] = -\sum_{i=1}^{3}\sum_{j=1}^{N_i-1}\lambda_i u_{j\bar{x}x}^i v_j^i h_i - \sum_{i=1}^{2}\lambda_i\frac{2}{h_i}\left[\frac{u_0^{i+1} - u_{N_i}^i}{\lambda_i/k_i^T} - u_{N_i\bar{x}}^i\right] v_{N_i}^i\frac{h_i}{2}$$

$$-\sum_{i=2}^{3}\lambda_i\frac{2}{h_i}\left[u_{0x}^i - \frac{u_0^i - u_{N_{i-1}}^{i-1}}{\lambda_i/k_{i-1}^T}\right] v_0^i\frac{h_i}{2} - \lambda_3\frac{2}{h_3}\left[\frac{-u_{N_3}^3}{\lambda_3/k_3^T} - u_{N_3\bar{x}}^3\right] v_{N_3}^3\frac{h_3}{2}$$

$$= -\sum_{i=1}^{3}\sum_{j=1}^{N_i-1}\lambda_i u_j^i v_{j\bar{x}x}^i h_i + \sum_{i=1}^{3}\lambda_i u_{N_i}^i v_{N_i\bar{x}}^i \sum_{i=2.}^{3}\lambda_i u_0^i v_{0x}^i \sum_{i=1}^{2}\lambda_i\frac{u_0^{i+1}}{\lambda_i/k_i^T} v_{N_i}^i$$

$$+\sum_{i=1}^{2}\lambda_i\frac{u_{N_i}^i}{\lambda_i/k_i^T} v_{N_i}^i + \sum_{i=2}^{3}\lambda_i\frac{u_0^i}{\lambda_i/k_{i-1}^T} v_0^i \sum_{i=2}^{3}\lambda_i\frac{u_{N_{i-1}}^{i-1}}{\lambda_i/k_{i-1}^T} v_0^i + \lambda_3\frac{u_{N_3}^3}{\lambda_3/k_3^T} v_{N_3}^3$$

$$= -\sum_{i=1}^{3}\sum_{j=1}^{N_i-1}\lambda_i u_j^i v_{j\bar{x}x}^i h_i + \left[\sum_{i=1}^{3}\lambda_i u_{N_i}^i v_{N_i\bar{x}}^i \sum_{i=2}^{3}\lambda_i\frac{u_{N_{i-1}}^{i-1}}{\lambda_i/k_{i-1}^T} v_0^i + \sum_{i=1}^{2}\lambda_i\frac{u_{N_i}^i}{\lambda_i/k_i^T} v_{N_i}^i\right]$$

$$-\left[\sum_{i=2}^{3}\lambda_i u_0^i v_{0x}^i + \sum_{i=1}^{2}\lambda_i\frac{u_0^{i+1}}{\lambda_i/k_i^T} v_{N_i}^i \sum_{i=2}^{3}\lambda_i\frac{u_0^i}{\lambda_i/k_{i-1}^T} v_0^i\right] + \lambda_3\frac{u_{N_3}^3}{\lambda_3/k_3^T} v_{N_3}^3$$

$$= -\sum_{i=1}^{3}\sum_{j=1}^{N_i-1}\lambda_i u_j^i v_{j\bar{x}x}^i h_i + \left[\sum_{i=1}^{2}\lambda_i u_{N_i}^i v_{N_i\bar{x}}^i \sum_{i=1}^{2}\lambda_i\frac{u_{N_i}^i}{\lambda_i/k_i^T} v_0^{i+1} + \sum_{i=1}^{2}\lambda_i\frac{u_{N_i}^i}{\lambda_i/k_i^T} v_{N_i}^i\right]$$

$$-\left[\sum_{i=2}^{3}\lambda_i u_0^i v_{0x}^i + \sum_{i=2}^{3}\lambda_i\frac{u_0^i}{\lambda_i/k_{i-1}^T} v_{N_{i-1}}^{i-1} \sum_{i=2}^{3}\lambda_i\frac{u_0^i}{\lambda_i/k_{i-1}^T} v_0^i\right]$$

$$+\lambda_3 u_{N_3}^3 v_{N_3\bar{x}}^3 + \lambda_3\frac{u_{N_3}^3}{\lambda_3/k_3^T} v_{N_3}^3$$

$$= -\sum_{i=1}^{3}\sum_{j=1}^{N_i-1}\lambda_i u_j^i v_{j\bar{x}x}^i v_j^i h_i - \sum_{i=1}^{2}\lambda_i\left[\frac{v_0^{i+1} - v_{N_i}^i}{\lambda_i/k_i^T} - v_{N_i\bar{x}}^i\right] u_{N_i}^i$$

$$-\sum_{i=2}^{3}\lambda_i\left[v_{0x}^i - \frac{v_0^i - v_{N_{i-1}}^{i-1}}{\lambda_i/k_{i-1}^T}\right] u_0^i - -\lambda_3\left[\frac{-v_{N_3}^3}{\lambda_3/k_3^T} - v_{N_3\bar{x}}^3\right] u_{N_3}^3$$

$$= [u, A_h v],$$

то оператор A_h самоспряжений.

Оскільки

$$[A_h u, u] = -\sum_{i=1}^{3}\sum_{j=1}^{N_i-1}\lambda_i u_{j\bar{x}x}^i u_j^i h_i - \sum_{i=1}^{2}\lambda_i\frac{2}{h_i}\left[\frac{u_0^{i+1} - u_{N_i}^i}{\lambda_i/k_i^T} - u_{N_i\bar{x}}^i\right] u_{N_i}^i\frac{h_i}{2}$$

$$
\begin{aligned}
&-\sum_{i=2}^{3}\lambda_i\frac{2}{h_i}\left[u^i_{0x}-\frac{u^i_0-u^{i-1}_{N_{i-1}}}{\lambda_i/k^T_{i-1}}\right]u^i_0\frac{h_i}{2}-\lambda_3\frac{2}{h_3}\left[\frac{-u^3_{N_3}}{\lambda_3/k^T_3}-u^3_{N_3\bar{x}}\right]u^3_{N_3}\frac{h_3}{2}\\
&=-\sum_{i=1}^{3}\sum_{j=0}^{N_i-1}\lambda_i u^i_{jx}u^i_j+\sum_{i=1}^{3}\sum_{j=1}^{N_i}\lambda_i u^i_{j\bar{x}}u^i_j-\sum_{i=1}^{2}k^T_i\left(u^{i+1}_0-u^i_{N_i}\right)u^i_{N_i}\\
&\quad+\sum_{i=1}^{2}k^T_i\left(u^{i+1}_0-u^i_{N_i}\right)u^{i+1}_0+k^T_3\left(u^3_{N_3}\right)^2\\
&=\sum_{i=1}^{3}\sum_{j=1}^{N_i}\lambda_i\left(u^i_{j\bar{x}}\right)^2h_i+\sum_{i=1}^{2}k^T_i\left(u^{i+1}_0-u^i_{N_i}\right)^2+k^T_3\left(u^3_{N_3}\right)^2\\
&\geq\gamma\|u]|^2_1,
\end{aligned}
$$

де $\gamma=\min_{i=1,2,3}\{\lambda_i,1\}>0$, то оператор A_h додатньо визначений. Лема 1 доведена. □

Схема методу прямих для нелінійної задачі про розподіл концентрацій компонент будується подібним чином:

$$
\frac{dV^j(t)}{dt}+A^j_hV^j(t)+\alpha_jB_h\left(V^1(t),V^2(t)\right)=0, \tag{26}
$$

$$
V^j(0)=S^0_jE^1,\qquad j=1,2,
$$

де $V^j(t)=(V^j(x^1_0,t),V^j(x^1_1,t),\dots,V^j(x^1_{N_1},t))^T$,

$$
[A^j_hV^j(t)]_i=\begin{cases}-D_j\frac{2}{h_1}\left[V^j_{0x}(t)-\frac{V^j_0(t)-\varphi^j(t)}{D_j/k^S_j}\right], & i=0,\\ -D_jV^j_{i\bar{x}x}(t), & i=1,\dots,N_i-1,\\ -D_j\frac{2}{h_1}V^j_{N_1\bar{x}}, & i=N_1,\end{cases}
$$

$[B_h(V^1(t),V^2(t))]_i=v(V^1(x^1_i,t),V^2(x^1_i,t))$, E_1 — одиничний вектор розмірності N_1+1.

Лема 2. *Оператор A^j_h — самоспряжений, додатньо визначений.*

Доведення аналогічне доведенню леми 1. □

Лема 3. *Оператор B_h — ліпшиць-неперервний.*

Доведення. Оскільки

$$
\begin{aligned}
&\left|v\left(V^1,V^2\right)-v\left(S^1,S^2\right)\right|=v_{\max}\left|\frac{V^1V^2}{K^M_1V^2+K^M_2V^1+V^1V^2}-\frac{S^1S^2}{K^M_1S^2+K^M_2S^1+S^1S^2}\right|\\
&=v_{\max}\left|\frac{K^1_M\left(V^1-S^1\right)}{\left(K^M_1+K^M_2V^1/V^2+V^1\right)\left(K^M_1+K^M_2S^1/S^2+S^1\right)}\right.\\
&\qquad\left.+\frac{K^2_M(V^2-S^2)}{\left(K^M_1V^2/V^1+K^M_2+V^2\right)\left(K^M_1S^2/S^1+K^M_2+S^2\right)}\right|\\
&\leq c\left(\left|V^1-S^1\right|+\left|V^2-S^2\right|\right),
\end{aligned} \tag{27}
$$

то

$$
\begin{aligned}
&\left|\left[B_h\left(V^1,V^2\right)-B_h\left(S^1,S^2\right),y\right]^{(1)}\right|\\
&\leq c\sum_{j=1}^{N_1-1}h_1\left(\left|V^1_j-S^1_j\right|+\left|V^2_j-S^2_j\right|\right)|y_j|\\
&\quad+\frac{1}{2}ch_1\left(\left(\left|V^1_0-S^1_0\right|+\left|V^2_0-S^2_0\right|\right)|y_0|+\left(\left|V^1_{N_1}-S^1_{N_1}\right|+\left|V^2_{N_1}-S^2_{N_1}\right|\right)|y_{N_1}|\right)
\end{aligned}
$$

$$\leq c\left(\left|[V^1 - S^1]\right|^{(1)} + \left|[V^2 - S^2]\right|^{(1)}\right) |[y]|^{(1)}.$$

Отже,

$$\left|[B_h\left(V^1(t), V^2(t)\right) - B_h\left(S^1(t), S^2(t)\right)]\right|^{(1)} \leq c_1 \left\{ \sum_{j=1}^{2} \left[\left|[V^j(t) - S^j(t)]\right|^{(1)} \right] \right\}^{1/2}.$$

Лема 3 доведена. □

Теорема 3. *Розв'язок задачі (26) збігається до розв'язку задачі (8)–(11) при $h_1 \to 0$, причому мають місце оцінки*

$$\left(\sum_{j=1}^{2} \|V^j - S_j\|^2_{L_\infty(0,T;L_2(\overline{\omega^1}))}\right)^{1/2} \leq ch_1 \left(\sum_{j=1}^{2}\left(\left\|\frac{\partial^2 S_j}{\partial t \partial x}\right\|^2_{L_2(Q_T^1)} + \left\|\frac{\partial S_j}{\partial x}\right\|^2_{L_2(Q_T^1)}\right)\right)^{1/2}, \tag{28}$$

та

$$\left(\sum_{j=1}^{2} \|V^j - S_j\|^2_{L_2(0,T;H_h^1)}\right)^{1/2} \leq ch_1 \left(\sum_{j=1}^{2}\left(\left\|\frac{\partial^2 S_j}{\partial t \partial x}\right\|^2_{L_2(Q_T^1)} + \left\|\frac{\partial S_j}{\partial x}\right\|^2_{L_2(Q_T^1)}\right)\right)^{1/2}, \tag{29}$$

в яких постійна c не залежить від h_1.

Доведення. Для похибки $z^j = V^j - S_j$, $j = 1, 2$, запишемо наступну задачу:

$$\frac{dz^j}{dt} + A_h^j V^j(t) - A_h^j S_j(t) + \alpha_j\left[B_h\left(V^1(t), V^2(t)\right) - B_h\left(S_1(t), S_2(t)\right)\right] = \Psi^j(t), \tag{30}$$

$$z^j(0) = 0,$$

де

$$\Psi^j(x,t) = \frac{\partial S_j}{\partial t} - T^x\left(\frac{\partial S_j}{\partial t}\right) + \alpha_j\left(v(S_1, S_2) - T^x v(S_1, S_2)\right), \qquad x \in \overline{\omega^1},$$

$T^x(f)$ — оператори точних різницевих схем, які як відомо, другу пôхідну апроксимують точно [27].

Помноживши (30) скалярно в $L_2(0,t;L_2(\overline{\omega^1}))$ на z^j, отримаємо тотожність:

$$\frac{1}{2}\left(\left|[z^j(t)]\right|^{(1)}\right)^2 + D_j \int_0^t \left(\left\|z^j(\tau)]\right|_1^{(1)}\right)^2 d\tau$$

$$= \alpha_j \int_0^t \left[v\left(V^1(\tau), V^2(\tau)\right) - v\left(S^1(\tau), S^2(\tau)\right), z^j(\tau)\right]^{(1)} d\tau$$

$$+ \int_0^t [\Psi^j(\tau), z^j(\tau)]^{(1)} d\tau.$$

Використовуючи лему 2 та ε-нерівність, отримаємо:

$$\frac{1}{2}\sum_{j=1}^{2}\left(\left|[z^j(t)]\right|^{(1)}\right)^2 + \min\{D_1, D_2\} \int_0^t \sum_{j=1}^{2}\left(\left\|z^j(\tau)]\right|_1^{(1)}\right)^2 d\tau$$

$$\leq \frac{c}{2}\int_0^t \sum_{j=1}^{2}\left(\left|[z^j(\tau)]\right|^{(1)}\right)^2 d\tau + \frac{1}{2}\int_0^t \left(\left|[\Psi^j(\tau)]\right|^{(1)}\right)^2 d\tau, \tag{31}$$

звідки

$$\sum_{j=1}^{2}\left(\left|[z^j(t)]\right|^{(1)}\right)^2 \leq e^{ct}\int_0^t \sum_{j=1}^{2}\left(\left|[\Psi^j(\tau)]\right|^{(1)}\right)^2 d\tau. \tag{32}$$

Для оцінки $(|[\Psi^j(\tau)]|^{(1)})^2$ скористаємось нерівністю

$$|[f - Tf]|^{(1)} \leq h_1 \left\|\frac{\partial f}{\partial x}\right\|_{L_2(0,x^{(1)})}$$

для $v(S_1, S_2)$ та $\partial S_j/\partial t$, $j = 1, 2$. В результаті з нерівності (32) отримаємо оцінку (28) і, використовуючи (28), з нерівності (31) отримаємо оцінку (29), що і завершує доведення теореми 3. □

Теорема 4. *Розв'язок задачі (24) збігається до розв'язку задачі (1)–(6) при $h \to 0$, причому мають місце оцінки:*

$$\|y + \Psi - u\|_{L_\infty(0,T;L_2(\overline{\omega}))} \le ch\left(\sum_{i=1}^{3}\|\frac{\partial^2 u_i}{\partial t\partial x}\|^2_{L_2(Q^i_T)} + \sum_{j=1}^{2}\left(\|\frac{\partial^2 S_j}{\partial t\partial x}\|^2_{L_2(Q^1_T)} + \|\frac{\partial S_j}{\partial x}\|^2_{L_2(Q^1_T)}\right)\right)^{1/2}, \tag{33}$$

$$\|y + \Psi - u\|_{L_2(0,T;H_h)} \le ch\left(\sum_{i=1}^{3}\|\frac{\partial^2 u_i}{\partial t\partial x}\|^2_{L_2(Q^i_T)} + \sum_{j=1}^{2}\left(\|\frac{\partial^2 S_j}{\partial t\partial x}\|^2_{L_2(Q^1_T)} + \|\frac{\partial S_j}{\partial x}\|^2_{L_2(Q^1_T)}\right)\right)^{1/2}, \tag{34}$$

де $h = \max_{i=1,2,3}\{h_i\}$ і постійна c не залежить від h.

Доведення. Для оцінки похибки $z = y - u$ запишемо задачу:

$$\rho C\frac{dz}{dt} + A_h z(t) = \Psi(t), \tag{35}$$

$$z(0) = 0,$$

де

$$\Psi_1(x,t) = \rho_1 C_1\left(\frac{\partial u_1}{\partial t} - T^x\left(\frac{\partial u_1}{\partial t}\right)\right) + Q\left(v(V^1, V^2) - v(S_1, S_2)\right) + Q\left(v(S_1, S_2) - T^x v(S_1, S_2)\right), \qquad x \in \omega^1_+,$$

$$\Psi_i(x,t) = \rho_i C_i\left(\frac{\partial u_i}{\partial t} - T^x\left(\frac{\partial u_i}{\partial t}\right)\right), \qquad x \in \overline{\omega^i},\ i = 2, 3.$$

Помноживши (35) скалярно в $L_2(0,t;L_2(\overline{\omega}))$ на z, в результаті перетворень прийдемо до тотожності:

$$\frac{1}{2}\left\|\left[\sqrt{\rho C}z(t)\right]\right\|^2 + \int_0^t \left\|\sqrt{\lambda}z(\tau)\right]\Big|_1^2 d\tau = \int_0^t [\Psi(\tau), z(\tau)]\, d\tau,$$

звідки отримаємо оцінку

$$\|[z(t)]\|^2 \le e^{ct}\int_0^t \|[\Psi(\tau)]\|^2 d\tau. \tag{36}$$

Неважко помітити, що

$$\|[f - Tf]\| \le \sum_{i=1}^{3} h_i\left\|\frac{\partial f_i}{\partial x}\right\|_{L_2(x^{(i-1)}, x^{(i)})}.$$

Тому скориставшись також нерівностями (27) та (28), з (36) отримаємо оцінки (33), (34), що і завершує доведення теореми 4. □

3. Повністю дискретна апроксимація

Для того, щоб отримати повну дискретну апроксимацію задачі (1)–(6), до схеми методу прямих (24) з лінійним оператором A_h, що визначається за формулою (25), застосуємо техніку, яка базується на перетворенні Келі, і вперше була запропонована в роботах [17, 18, 19, 20, 21, 22].

Згідно леми 1, A_h — самоспряжений, додатньо визначений оператор в гільбертовому просторі H_h.

Оцінимо спектральну множину $\Sigma(A_h) \subset [\mu, M]$. Використовуючи техніку роботи [28], отримаємо, що

$$\mu = \min\{\mu_1, \mu_2, \mu_3\},$$

де μ_i, $i = 1, 2, 3$, знаходимо як розв'зок наступних задач на власні значення:

1)

$$\lambda_1 u_{1\bar{x}x} + \mu_1 u_1 = 0, \qquad x \in \omega^1, \; u_1(0) = 0,$$
$$-\frac{2}{h_1}\lambda_1 u_{1\bar{x}} + \mu_1 u_1 = 0, \qquad x = x^{(1)},$$

2)

$$\lambda_2 u_{2\bar{x}x} + \mu_2 u_2 = 0, \qquad x \in \omega^2,$$
$$\frac{2}{h_2}\lambda_2 u_{2\bar{x}} + \mu_2 u_2 = 0, \qquad x = x^{(1)},$$
$$-\frac{2}{h_2}\lambda_2 u_{2\bar{x}} + \mu_2 u_2 = 0, \qquad x = x^{(2)},$$

3)

$$\lambda_3 u_{3\bar{x}x} + \mu_3 u_3 = 0, \qquad x \in \omega^3,$$
$$\frac{2}{h_3}\lambda_3 u_{3\bar{x}} + \mu_3 u_3 = 0, \qquad x = x^{(2)},$$
$$-\frac{2}{h_3}\lambda_3 u_{3\bar{x}} + \mu_3 u_3 = 0, \qquad x = 1.$$

Отже,

$$\mu = \min_{i=1,2,3}\left\{\frac{4\lambda_i}{h_i^2}\sin^2\frac{\pi h_i}{2(x^{(i)} - x^{(i-1)})^2}\right\} \geq \frac{4\lambda_{\min}}{h^2}\sin^2\frac{\pi h_{\min}}{2a^2}.$$

Використовуючи теорему Гершгоріна, отримаємо $M = 4\lambda_{\max}/h^2_{\min} + 4k^T_{\max}/h_{\min}$, де $\lambda_{\max} = \max_{i=1,2,3}\{\lambda_i\}$, $\lambda_{\min} = \min_{i=1,2,3}\{\lambda_i\}$,

$$k^T_{\max} = \max_{i=1,2,3}\left\{k^T_i\right\}, \qquad a = \max_{i=1,2,3}\left\{x^{(i)} - x^{(i-1)}\right\}, \qquad h_{\min} = \min_{i=1,2,3}\{h_i\}.$$

Отже, приходимо до висновку, що оператор A_h типу (див. [21])

$$\left(\frac{4\lambda_{\min}}{h^2}\sin^2\frac{\pi h_{\min}}{2a^2}, \frac{4\lambda_{\max}}{h^2_{\min}}\left(1 + \frac{k^T_{\max}h_{\min}}{\lambda_{\max}}\right), 0\right).$$

Згідно роботи cite21 точний розв'язок задачі (24) визначається за формулою

$$y(t) = e^{-\gamma t}\sum_{p=0}^{\infty}(-1)^p L_p^{(0)}(2\gamma t)[\omega_{\gamma,p} + \omega_{\gamma,p+1}],$$

де $\omega_{\gamma,k}$ — розв'язки операторних рівнянь:

$$(\gamma I + A_h)\omega_{\gamma,k+1} = (\gamma I - A_h)\omega_{\gamma,k}, \qquad k = 0, 1, \ldots, \; \omega_{\gamma,0} = u_0 = T_{amb},$$

$L_k^{(0)}$ — многочлени Лагерра, γ — довільне додатне число.

Відповідно, наближений розв'язок задачі (24), а отже і задачі (1)–(6), визначається за формулою:

$$y^N(t) = e^{-\gamma t}\sum_{p=0}^{N}(-1)^p L_p^{(0)}(2\gamma t)[\omega_{\gamma,p} + \omega_{\gamma,p+1}], \tag{37}$$

причому має місце оцінка

$$\sup_{t\in[0,\infty)}\left\|y(t) - y^N(t)\right\| \leq c q_\gamma^{N+1}\frac{1 + q_\gamma}{1 - q_\gamma}[\|y(0)\|], \tag{38}$$

де $q_\gamma = \max\{|(\gamma - \mu)/(\gamma + \mu)|, |(M - \gamma)/(M + \gamma)|\}$.

Більш того, можна вибрати оптимальне γ, для якого $q_\gamma = q_{\text{opt}}$ найменше:

$$q_{\text{opt}} = q(\gamma_{\text{opt}}) = \frac{\sqrt{M} - \sqrt{\mu}}{\sqrt{M} + \sqrt{\mu}}, \qquad \gamma_{\text{opt}} = \sqrt{\mu M},$$

тобто

$$\gamma_{\text{opt}} = \frac{4\sqrt{\lambda_{\max}\lambda_{\min}}}{h^2}\sqrt{1 + \frac{k_{\max}^T h}{\lambda_{\max}}}\sin\frac{\pi h_{\min}}{2a^2},$$

$$q_{\text{opt}} \le 1 - \sqrt{\frac{\mu}{M}} = 1 - \frac{h_{\min}}{h}\sqrt{\frac{\lambda_{\min}}{\lambda_{\max}}}\left(1 + \frac{k_{\max}^T h_{\min}}{\lambda_{\max}}\right)^{-1/2}\sin\frac{\pi h_{\min}}{2a^2}$$
$$\le 1 - \frac{\pi h_{\min}}{2a^2}\sqrt{\frac{\lambda_{\min}}{\lambda_{\max}}}\left(1 + \frac{k_{\max}^T}{\lambda_{\max}}\right)^{-1/2} \le 1 - ch_{\min}. \tag{39}$$

Теорема 5. *Нехай виконуються умови теорем 1 та 2. Тоді наближений розв'язок (37) збігається до розв'язку задачі (1)–(6), і має місце оцінка:*

$$\left\|y^N + \Psi - u\right\|_{L_\infty(0,T;L_2(\bar\omega))}$$
$$\le ch\left(\left(\sum_{i=1}^{3}\left\|\frac{\partial^2 u_i}{\partial t\partial x}\right\|^2_{L_2(Q_T)} + \sum_{j=1}^{2}\left(\left\|\frac{\partial^2 S_j}{\partial t\partial x}\right\|^2_{L_2(Q_T^1)} + \left\|\frac{\partial S_j}{\partial x}\right\|^2_{L_2(Q_T^1)}\right)\right)^{1/2} + T_{amb}\right), \tag{40}$$

де постійна c не залежить від h.

Доведення. Очевидно, що

$$\left\|y^N + \Psi - u\right\|_{L_\infty(0,\tilde T;L_2(\bar\omega))} \le \left\|y^N - y\right\|_{L_\infty(0,\tilde T;L_2(\bar\omega))} + \left\|y + \Psi - u\right\|_{L_\infty(0,\tilde T;L_2(\bar\omega))}. \tag{41}$$

Для оцінки першого доданку правої частини скористаємось оцінками (38),(39). В результаті отримаємо:

$$\left\|y^N - y\right\|_{L_\infty(0,T;L_2(\bar\omega))} \le c_1(1 - ch_{\min})^N h_{\min}^{-1}|[y(0)]|.$$

Вибираючи

$$N = 2\left[\frac{\ln h}{\ln(1 - ch_{\min})}\right] + 1,$$

де

$$c = \frac{\pi}{2a^2}\sqrt{\frac{\lambda_{\min}}{\lambda_{\max}}}\left(1 + \frac{k_{\max}^T}{\lambda_{\max}}\right)^{-1/2},$$

та враховуючи, що $|[y(0)] \le T_{amb}$, отримаємо нерівність:

$$\left\|y^N - y\right\|_{L_\infty(0,T;L_2(\bar\omega))} \le chT_{amb}.$$

Користуючись останньою нерівністю та нерівністю (33), з (41) отримаємо оцінку (40). Теорема 5 доведена. ☐

Література

1. В. С. Зарубин, *Инженерные методы решения задач теплопроводности*, "Энергоатомиздат", Москва, 1983.
2. Д. Ши, *Численные методы в задачах теплообмена*, "Мир", Москва, 1986.
3. Ю.П. Шлыков, Е.А. Ганин, *Контактный теплообмен*, "Энергоатомиздат", Москва, 1987.
4. A. A. Samarskii and P.V. Vabishchevich, *Computational heat transfer*, Chichester, Wiley, 1995.
5. Н. И. Николаев, *Диффузия в мембранах*, "Химия", Москва, 1980.
6. W. Gopel, J. Hesse, and J.N. Zemel, *Thermal Sensors*, VCH Verlag, Weinheim, 1990.
7. Y. Hanazato, S. Shiono, and M. Maeda, *Response characteristics of the glucose-sensitive field-effect transistor. Computer simulation of the effect of gluconolactonase coimmobilization in a glucose oxidase membranes*, Anal. Chim. Acta (1990), № 231, 213–220.
8. B. Xie, B. Danielsson, P. Noberg, F. Winguist, and I. Lundstrom, *Development of a thermal micro-biosensor fabricated on a silicon chip*, Sens. Actuat. (1992), № B6, 127–130.

9. V. Rossokhaty and N. Rossokhataya, *A mathematical model of silicon based thermobiosensors*, IMA Journ. Math. Appl. Busn. Industr. (1999), № 10, 41–53.
10. M. Schechter, *A generalization of the problem of transmission*, Ann. Sc. Norm. Sup. (1960), № 14, 207–236.
11. В. П. Ильин, И. А. Шишмарев, *Метод потенциалов для задачи Дирихле и Неймана в случае уравнений с разрывными коефициентами*, Сиб. математич. журн., № 11, 46–58.
12. З. Г. Шефтель, *Энергетические неравенства и общие граничные задачи для эллиптических уравнений с разрывными коэффициентами*, Сиб. математич. журн., № VI, 636–668.
13. В. С. Дейнека, И. В. Сергиенко, В. В. Скопецкий, *Математические модели и методы расчета задач с разрывными решениями*, "Наукова думка", Киев, 1995.
14. Б. Я. Ройтберг, *Задачи трансмиссии в областях с негладкими границами*, Доп. НАН України (1996), № 3, 15–20.
15. M. Gostabel and E. P. Stephan, *A direct boundary integral equation method for transmission problems*, J. Math. Anal. Appl. (1985), № 106, 367–413.
16. M. Gostabel and E. P. Stephen, *Integral equations for transmission problem in linear elasticity*, J. Integr. Eq. Appl. (1990), № 2, 211–223.
17. D. Z. Arov and I. P. Gavrilyuk, *A method for solving initial value problems for linear differential equations in Hilbert space based on the Cayley transform*, Numer. Func. Anal. and Optimiz. (1993), № 14, 456–473.
18. I. P. Gavrilyuk and V. L. Makarov, *The Cayley transform and the solution of an initial value problems for a first order differential equation with an unbounded operator coefficient in Hilbert space*, Numer. Func. Anal. and Optimiz. (1994), № 15, 583–598.
19. D. Z. Arov, I. P. Gavrilyuk, and V. L. Makarov, *Pitman Research Notes in Mathematics Series*, Longman, 1995.
20. I. P. Gavrilyuk and V. L. Makarov, *Representation and approximation of the solution of an initial value problem for a first order differential equation in Banach space*, Journal of Analysis and Applications (1996), № 15, 495–527.
21. I. P. Gavrilyuk, *Some new discretizations of evolution equations*, Universität Leipzig, NTZ (1997), № Preprint Nr. 39/1997.
22. I. P. Gavrilyuk and V. L. Makarov, *Explicit and approximate solutions second order evolution differential equations in Hilbert space*, Numer. Methods Partial Differential Eq. (1999), № 15, 111–131.
23. О. А. Ладыженская, В. А. Солонников, Н. Н. Уральцева, *Линейные и квазилинейные уравнения параболического типа*, "Наука", Москва, 1967.
24. А. Фридман, *Уравнения с частными производными параболического типа*, "Мир", Москва, 1968.
25. Г. Н. Положий, *Уравнения математической физики*, "Высшая школа", Москва, 1964.
26. И.Г. Петровский, *Лекции по теории интегральных уравнений*, Издательство МГУ, Москва, 1984.
27. А. А. Самарский, Р. Д. Лазаров, В. Л. Макаров, *Разностные схемы для дифференциальных уравнений с обобщенными решениями*, "Высшая школа", Москва, 1987.
28. N. Rossokhata, *Fully discrete approximation based on Cayley transform for parabolic transmission problem*, Proceedings of World Multiconference on Systemics, Cybernetics and Informatics (1998), № 2, 373–377.

Інститут математики НАН України,

Київський університет імені Тараса Шевченка

Леіпцігський університет

Надійшла 25/10/1999