# 11. МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ПРОЦЕССОВ ПЕРЕНОСА. 2.

*Отыскание общего в частном, вечного в преходящем и составляет задачу научного мышления.*

Анри ПУАНКАРЕ

В предшествующей главе мы рассмотрели процессы переноса тепла и вещества. При этом оказалось, что оба эти явления описываются одним и тем же уравнением, называемым уравнением теплопроводности (в теплофизике) и диффузии (в молекулярной физике). Эти процессы описываются одинаковыми уравнениями, однако входящие в них величины имеют различный физический смысл и различную физическую размерность. Однако за счет замены переменных можно получить математическую модель в безразмерных характеристиках, которым можно придать различную интерпретацию. Эта идея лежит в основе теории подобия, применению которой посвящается Раздел 1 настоящей лекции.

В Разделе 2 продолжим исследование математических моделей процессов переноса и убедимся в том, что, казалось бы, крайне далекий от физики процесс распространения товара также описывается этим уравнением. Для систем с сосредоточенными параметрами мы неоднократно сталкивались с ситуацией, когда одни и те же математические соотношения могут иметь различные интерпретации, будучи математическими моделями совершенно разных явлений. Аналогичная ситуация наблюдается и для систем с распределенными параметрами.

При анализе систем с сосредоточенными параметрами мы уже отмечали, что нахождение аналитического решения задачи возможно лишь в исключительных случаях. Тем более это реализуется для систем с распределенными параметрами, описываемыми уравнениями с частными производными. В Разделе 3 мы рассмотрим метод конечных разностей для решения уравнения теплопроводности, являющийся обобщением описанного в Главе 2 метода Эйлера. С его помощью можно найти приближенное решение широкого класса задач математической физики.

В Главе 6 мы рассматривали математические модели химических реакций, а в Главе 10 – процесс диффузии. Оба процесса описываются концентрациями рассматриваемых веществ. На практике возможна ситуация, когда происходит диффузия некоторых веществ в условиях химических реакций. Для этого процесса можно использовать математическую модель, сочетающую в себе оба указанных эффекта. Она представляет собой систему уравнений диффузии относительно реагирующих веществ, в правые части которых входят выражения, описывающие данные реакции, см. Раздел 4.

Еще одна математическая модель, представленная в данной лекции связана с процессом теплопроводности в условиях изменения агрегатного состояния вещества, см. Раздел 5. В этом случае за счет фазовых переходов (переход от твердой фазы в жидкую, из жидкой в газообразную или наоборот) со временем изменяются размеры рассматриваемого объекта. Рассматриваемый процесс характеризуется подвижной границей, на котором необходимо задать специфическое граничное условие Стефана.

В Приложении каждое из направлении лекции получает дальнейшее развитие. В частности, показывается что процессы переноса не ограничиваются явлениями теплопроводности, диффузии и распространения товара. Приводятся некоторые дополнительные результаты в области приближенного решения уравнений с частными производными. Описываются одна биологическая модель распределенной системы, а также некоторый аналог задачи Стефана с медицинской интерпретацией.

### **ЛЕКЦИЯ**

#### **1. Уравнение теплопроводности и теория подобия**

При анализе математических моделей часто осуществляется переход от естественных физических величин (независимых переменных, функций состояния, параметров системы) к некоторым комплексным величинам, составленным определенным образом из физических величин, исходя из природы изучаемого явления. Поясним этот подход, составляющий предмет ***теории подобия***[[1]](#endnote-1), на примере одной краевой задачи для уравнения теплопроводности.

Рассматривается перенос тепла в некотором однородном тонком длинном теле, равномерно нагретом в начальный момент времени, один конец которого теплоизолирован, а на другом происходит теплообмен с окружающей средой. Математической моделью этого процесса является краевая задача

 *cρut = λuxx*, 0<*x*<*L*, *t* >0, (11.1)

 *u*(*x*,0) = *ϕ*, 0<*x*<*L*, (11.2)

 *ux*(0,*t*) = 0, *λux*(*L*,*t*) = *k*[*u*(*L*,*t*) – *u*0], *t* >0, (11.3)

где *u=u*(*x*,*t*) *–* температура тела в точке *x* в момент времени *t*, *c –* теплоемкость, *ρ –* плотность, *λ –* теплопроводность, *L –* длина тела, *ϕ –* начальная температура, *k –* коэффициент теплообмена, *u*0 *–* температура окружающей среды.

Данная постановка задачи содержит значительное количество параметров. Попытаемся сделать замену переменных таким образом, чтобы упростить постановку задачи. Во-первых, переходя от температуры *u* к разности *u* – *u*0, мы добьемся того, что второе граничное условие (11.3) станет однородным, т.е. в его правой части исчезнет член *ku*0, не зависящий от функции состояния системы. При это структура остальных соотношений, составляющих математическую модель, останется неизменной. Действительно, новая функция состояния будет также удовлетворять уравнению теплопроводности, в начальный момент времени принимать постоянное значение *ϕ*–*u*0, а на левом конце тела мы вновь получаем однородное условие второго рода. Во-вторых, если же мы разделим новую функцию состояния на разность *ϕ*–*u*0, то правая часть начального условия будет равна единице, а не какому-то общему значению при сохранении структуры задачи. В-третьих, если от пространственной переменной *x* перейти к отношению *x*/*L*, то от произвольной длины тела мы перейдем к телу единичной длины.

Вводятся следующие переменные

*τ* = *t*/*θ*, *ξ* = *x*/*L*, *v =* (*u* – *u*0)/(*ϕ*–*u*0),

где переход от времени *t* к новой переменной *τ* за счет выбора константы *θ* будет произведен так, чтобы полученные соотношения имели как можно более простой вид. Очевидно, справедливы равенства

*vτ =* (*ϕ*–*u*0)-1*uτ =* (*ϕ*–*u*0)-1*uttτ =* (*ϕ*–*u*0)-1*θut*,

*vξ =* (*ϕ*–*u*0)-1*uξ =* (*ϕ*–*u*0)-1*uxxξ =* (*ϕ*–*u*0)-1*Lux*,

*vξξ =* (*vξ*)*ξ* = (*ϕ*–*u*0)-1*L*(*ux*)*ξ* = (*ϕ*–*u*0)-1*Luxxxξ =* (*ϕ*–*u*0)-1*L*2*uxx*.

Подставляя полученные выражение в уравнение (11.1), имеем

*θcρvτ = L*2*λvξξ*.

Выбирая константу *θ = L*2*λ*/*cρ*, приходим к уравнению

 *vτ*(*ξ*,*τ*) = *vξξ*(*ξ*,*τ*), 0<*ξ*<1, *τ*>0. (11.4)

Начальное условие принимает вид

 *v*(*ξ*,0) = 1, 0<*ξ*<1. (11.5)

Обратимся ко второму граничному условию (11.3)

*Lλvξ*(1,*τ*) = *kv*(1,*τ*).

Введем константу Bi = *k*/*Lλ*, называемую ***числом Био***. В результате граничные условия принимают вид

 *vξ*(0,*τ*) = 0,  *vξ*(1,*τ*) = Bi *v*(0,*τ*), *τ*>0. (11.6)

Сравнивая задачи (11.1) – (11.3) и (11.4) – (11.6), можно отметить, что при совпадении их общей структуры вторая задача оказывается существенно проще. Вместо семи числовых параметров она включает в себя единственный параметр – число Био. Кроме того, как функция состояния, так и пространственная переменная оказываются безразмерными величинами, будучи отношениями двух однотипных величин, соответственно, температур и расстояний. Нетрудно убедиться, что переменная *τ* также является безразмерной величиной, называемой ***числом Фурье***. Однако, коль скоро задача (11.4) – (11.6) связана исключительно с безразмерными величинами, то ее свойства могут быть использованы для анализа не только исходной системы с различным набором параметров системы, но и для исследовании других процессов переноса, характеризуемых моделями типа (11.1) – (11.3). В этом и состоит смысл теории подобия[[2]](#endnote-2).

**Задание 11.1. Уравнение диффузии и теория подобия**. Дать постановку математической модели процесса массопереноса, аналогичную системе (11.1) – (11.3). С помощью описанной выше методики привести ее к задаче (11.4) – (11.6), обратив внимание на физический смысл чисел Био и Фурье.

***В соответствии с теорией подобия модель можно привести к безразмерным переменным,
сократив число параметров систему и упростив постановку задачи.***

#### **2. Уравнение распространения товара**

Сравнивая вывод уравнений теплопроводности и диффузии, а также получаемый конечный результат, обращаем внимание на несомненную близость математического описания этих явлений. Рассмотрим еще один процесс, относящийся к экономике и, казалось бы, не имеющий никакого отношения к рассмотренным ранее. Рассматривается некоторый товар, пользующийся спросом в некоторой области и неравномерно распределенный там. Со временем можно наблюдать перераспределение товара из области, где он был в избытке, а значит, не пользовался особым спросом, в область, где его сравнительно мало, а значит, он пользуется существенным спросом. Процесс распространения товара можно охарактеризовать с помощью ***плотности товаров*** – товара, находящегося на единице территории. Для простоты ограничимся рассмотрением одномерного случае, например, событиями, происходящими вдоль некоторой достаточно большой изолированной железнодорожной линии. Тогда плотность товара *u*, будет зависеть лишь от времени *t* и пространственной координаты *х*.

Оценим изменение товара на участке [*x*,*x*+Δ*x*] за время от *t* до *t*+Δ*t*. Если плотность товара в рассматриваемой области постоянна, то количество товара на участке длиной Δ*х* равно

*Q = u*Δ*x*.

В случае переменной плотности товара установим соотношение

*dQ = udx*.

Тогда на отрезке [*x*,*x*+Δ*x*] имеем количество товара



Таким образом, изменение количество товара за время от *t* до *t*+Δ*t* на указанном участке равно



Мы ограничимся рассмотрением изменения плотности товара в области исключительно за его перевозки из области с высокой плотностью товара в область, где она низка, что находжится в полном соответствии с принципами коммерческой деятельности. Это явление описывается ***потоком товара*** *q*, выражающим товара, проходящий в единицу времени через данную точку.

 Если поток товара постоянный, то за время Δ*t* получаем количество товара

*Q = q*Δ*t*.

В случае переменного потока справедлива формула

*dQ = qdt*.

Таким образом, на интервале времени [*t*,*t*+Δ*t*] имеется



Таким образом, изменение количества товара на участке [*x*,*x*+Δ*x*] за данное время равно



Установим связь между потоком и плотностью товара. Рассмотрим некоторые точки *x*1 и *x*2 при *x*1 < *x*2  с плотностью товара *u*1 и *u*2 соответственно. Поток товара, видимо, будет прямо пропорционален разности между плотностями товара и обратно пропорционален расстоянию между точками. Действительно, поток товара будет больше в случае большего дисбаланса товара, имеющегося на малом участке, поскольку именно в этих условиях будет выгодно заниматься его поставками. Наконец, товар будет распространяться из области, где его много, в область, где его мало. В результате приходим к равенству



где параметр *D* является параметром процесса, характеризует возможности перевозки товара в данной области. Переходя к пределу при *x*2→*x*1, установим формулу



Тогда изменение количества товара будет равно



Закон сохранения товара на участке [*x*,*x*+Δ*x*] за время от *t* до *t*+Δ*t* при сделанных предположениях характеризуется условием *Q*1 = *Q*2. В результате получаем соотношение

 .

После применения теоремы о среднем, деления на величину Δ*x*Δ*t* и перехода к пределу установим равенство



называемое ***уравнением переноса товара***. В том случае, когда рассматриваемая область является однородной, то коэффициент перевозки товара *D* будет постоянным, а последнее соотношение приводится к виду

 *ut* = *Duxx*. (11.7)

Полученное соотношение с точностью до обозначений совпадает с рассмотренными в предшествующей лекции уравнениями теплопроводности и диффузии. Для него могут быть поставлены аналогичные краевые задачи. В Приложении будет показано, что к аналогичным уравнениям сводятся также математические модели других процессов.

**Задание 11.2. Первая краевая задача для уравнения переноса товара**. Рассматривается уравнение (11.7) на отрезке [0,*π*] с начальным условием *u*(*x*,0)=sin2*x* и однородными граничными условиями. Провести следующий анализ.

1. Дать экономическую интерпретацию поставленной задачи. При этом под нулевым значением функции *u* следует понимать среднее значение плотности товара в заданной области.

2. В соответствие с методом разделения переменных найти ее решение.

3. Найти закон изменения со временем потока товара на концах данной области. Объяснить полученный результат.

4. Установить поведение системы при неограниченном возрастании времени. Объяснить полученный результат.

5. Установить влияние коэффициента *D* на все предшествующие результаты. Объяснить экономический смысл полученных результатов.

***Процесс распространения товара описывается уравнением теплопроводности.***

#### **3. Метод конечных разностей для уравнения теплопроводности**

При анализе систем с сосредоточенными параметрами мы уже отмечали, что нахождение аналитического решения дифференциального уравнения возможно лишь в исключительных случаях. Тем более, это утверждение остается в силу для уравнений в частных производных. Однако в отсутствие аналитического решения сохраняется возможность нахождения приближенного решения задачи.

В Главе 2 был описан метод Эйлера для приближенного решения дифференциальных уравнений. Его идея состоит в разбиении области определения искомой функции на части и аппроксимации ее производной на границах этих участков соответствующим разностным *отношением*. Использование той же идеи применительно к уравнениям с частными производными приводит к ***методу конечных разностей***[[3]](#endnote-3). Дадим описание этого метода для первой краевой задачи для уравнения теплопроводности.

Рассматривается неоднородное уравнение теплопроводности

 *ut*(*x*,*t*) = *a*2*uxx*(*x*,*t*) + *f*(*x*,*t*), 0<*x*<*L*, *t* >0 (11.8)

с начальным условием

 *u*(*x*,0) = *ϕ*(*x*), 0<*x*<*L* (11.9)

и граничными условиями

 *u*(0,*t*) = *α*(*t*),  *u*(*L*,*t*) = *β*(*t*), *t* >0, (11.10)

где параметры *a* и *L* и функции *f*, *ϕ*, *α* и *β* известны.

Будем искать решение краевой задачи (11.8) – (11.10) на интервале [0,*T*]. Следуя описанному ранее методу Эйлера, разбиваем его на части с шагом *τ* = *T*/*N* точками *tj =τj*, *j=*0,…,*N*. Поскольку в данном случае мы имеем дело с функциями двух переменных, разобьем также пространственный интервал [0,*L*] с шагом *h* = *L*/*M* точками *xi =hi*, *i=*0,…,*M*. Решение уравнения (11.8) будем искать исключительно в точках (*xi*,*tj*), называемых ***узлами сетки***. При этом следует заменить содержащиеся в этом уравнении производные некоторыми приближенными соотношениями, связывающими значения рассматриваемой функции в некоторых узлах сетки.

Для аппроксимации производной по времени, входящей в левую часть равенства (11.8), воспользуемся той же формулой, что и в методе Эйлера. В частности, значение производной от функции *u* в произвольной точке *tj* будет приближенно равно разности между ее значениями в последующей точке *tj+*1 и данной точки *tj*, деленной на расстояние между этими точками, т.е. на шаг *τ*. При этом в качестве пространственного аргумента как производной, так и ее аппроксимации выбирается произвольное значение *xi*. Таким образом, будем использовать следующее соотношение



Можно показать, что для приближенного вычисления второй производной некоторой функции *g = g*(*x*) может быть использована следующая формула[[4]](#endnote-4)



при достаточно малых значениях шага *h*. Естественно, при аппроксимации второй производной в правой части равенства (11.8) в качестве *x* выбирается значение *xi*, а в качестве временного аргумента – значение *tj*. Тем самым получаем формулу



Подставляя полученные выражения в формулу (11.8) для произвольной точки (*xi*,*tj*), будем иметь

  (11.11)

где величины  называются ***сеточными функциями***. Соотношение (11.11) называется ***явной разностной схемой*** для уравнения теплопроводности[[5]](#endnote-5). В дополнение к нему следует добавить начальное условие (11.8) в точке *xi* и граничные условия (11.9) в точке *tj*. Получаем

  (11.12)

  (11.13)

где *ϕi =ϕ*(*xi*), *α j =α*(*tj*), *β j =β*(*tj*). Равенства (11.11) – (11.13) используются для нахождения приближенного решения краевой задачи (11.8) – (11.10).

Опишем алгоритм решения задачи на основе явной разностной схемы. Прежде всего, на основе формулы (11.12) находятся все значения искомой сеточной функции  при *j=*0, т.е. на нулевом временном слое. Затем из формул (11.13) определяются все ее граничные значения, т.е. соответствующие индексам *i=*0 и *i=M.* Далее предстоит использование основного соотношения (11.11). Предположим для произвольного фиксированного номера *j* известны все значения  на данном временном слое. Тогда ее значение на последующем временном слое определяется по формуле

  (11.14)

Таким образом, двигаюсь от слоя к слою по времени, т.е. от *j=*0 до последнего номера *j=N-*1, находим все значения .

Итак, метод конечных разностей может быть использован для любых значений известных функций. Он без труда распространяется на обобщения уравнения теплопроводности, описанные в предшествующей лекции. При незначительной корректировки его можно распространить и на вторую краевую задачу[[6]](#endnote-6).

Следует отметить, что приведенная выше явная разностная схема имеет один существенный недостаток. Она эффективно работает при выполнении ***условия устойчивости***

  (11.15)

называемое также ***условием Куранта*** или более полно – условием ***Куранта–Фридрихса–Леви***[[7]](#endnote-7). При нарушении этого соотношения, погрешности, появляющиеся при аппроксимации производных, накапливаются от слоя к слою по времени. Таким образом, сделав некоторое количество шагов по времени, мы получим существенное искажение результатов. В Приложение будет описана неявная разностная схема, которая является более сложной, но безусловно устойчивой.

**Задание 11.3. Метод конечных разностей для уравнения теплопроводности**. Объектом исследования является уравнение (11.8) на единичном отрезке при *a=*1с начальным условием (11.9) и граничными условиями (11.10). Провести следующий анализ.

1. Задать функцию *v*(*x*,*t*) = sin*πx* cos*πt* в качестве решения задачи. Выбирая в соотношениях (11.8) – (11.10) *u*(*x*,*t*)=*v*(*x*,*t*), найти соответствующие значения функций *f*, *ϕ*, *α* и *β*. Теперь мы знаем, что при найденных значения указанных функций рассматриваемая краевая задача для уравнения теплопроводности имеет именно это решение. Мы можем использовать его для оценки точности приближенного решения задачи в соответствии с методом конечных разностей.

2. Провести решение задачи (11.8) – (11.10) с найденными на предшествующим пункте задания в соответствии с явной схемой разностной схемой. При этом для выбора шага по пространственной переменной заданный единичный отрезок разбивается на 10 частей, а значение шага по времени выбирается исходя из условия устойчивости (11.15). Выполняется 10 шагов по времени. Поученные результаты сравниваются с точным решениемзадачи.

3. Провести решение задачи на данном отрезке, выбрав шаг *h* вдвое больше, по-прежнему выбирая шаг по времени исходя из условия устойчивости и делая 10 шагов по времени. Сравнить полученное приближенное решение с точным решением.

4. Провести решение задачи, выбрав шаг *h* вдвое меньше, чем в пункте 2, выбирая, как и раньше, шаг по времени исходя из условия устойчивости и делая 10 шагов по времени. Сравнить полученное приближенное решение с точным решением.

5. Провести решение задачи с шагами *h=*0.1, *τ* = 0.1. Оценить изменение от слоя к слою по времени погрешности



где приближенное решение  находится из соотношений (11.11) – (11.13), а а *v* есть изначально заданная функция.

***Для приближенного решения краевых задач для уравнения теплопроводности
применяется метод конечных разностей.***

***Явная разностная схема для уравнения теплопроводности
требует выполнение условия устойчивости.***

#### **4. Диффузия реагирующих веществ**

В Главе 6 рассматривались уравнения химической кинетики, описывающие изменение со временем концентраций реагирующих веществ. В Главе 10 приводилась математическая модель процесса диффузии, позволяющая установить распределение концентрации некоторого вещества в определенной области. Естественно предположить, что при рассмотрении химических реакций, происходящих в некоторой области, в которой реагирующие вещества распределены неравномерно, следует использовать математическая модель, учитывающую как течение химической реакции, так и диффузию исходных веществ и продуктов реакции.

Рассмотрим, к примеру, ***реакцию синтеза*** A+B→C. Данный процесс в Лекции описывался уравнениями

  (11.17)

  (11.18)

с соответствующими начальными условиями, где *a*, *b* и *c* являются, соответственно, концентрациями веществ A, B и C, а *k* есть скорость реакции.

Предположим теперь, что реакция происходит в некоторой области, которую для простоты будем считать одномерной, причем все рассматриваемые вещества распределены по ней неравномерно. Тогда концентрации веществ *a*, *b* и *c* зависят как от времени, так и от пространственной переменной *x*. Математическая модель данного процесса состоит из уравнений диффузии для каждого реагента, включающих в себя в качестве источника вещества (положительного или отрицательного) выражения, описывающие химическую реакцию и содержащиеся в правых частях уравнений (11.17), (11.18). В результате получаем уравнения

 *at = Da axx* – *kab*, (11.19)

 *bt = Db bxx* – *kab*, (11.20)

 *ct = Dc cxx* + *kab*, (11.21)

где *Da*, *Db* и *Dc* есть коэффициенты диффузии соответствующих веществ. К ним следует добавить соответствующие краевые условия.

Для решения полученной задачи следует сначала решить краевую задачу для системы уравнений (11.19), (11.20), а затем – линейное неоднородное уравнение (11.21) с соответствующими начальным и граничными условиями. И если последнюю задачу, в принципе, можно исследовать с помощью методов, описанных в предшествующей лекции, то для анализа системы нелинейных уравнений (11.19), (11.20) следует применять методы приближенного решения.

Аналогичные результаты могут быть получены для различных химических реакций, в частности тех, что рассматривались в Главе 6. В Приложении мы рассмотрим другие задачи, являющиеся обобщениями некоторых рассмотренных ранее систем с сосредоточенными параметрами, на аналогичные события, происходящие в пространстве.

**Задание 11.4. Численное решение уравнений диффузии для реакции синтеза**. Рассматривается первая краевая задача для уравнений (11.19) – (11.21). Следует выполнить следующие действия.

1. Описать метод конечных разностей для решения первой краевой задачи для уравнений (11.19) – (11.21).
2. Составить компьютерную программу в соответствии с разработанным алгоритмом.
3. Провести расчеты исследуемой системы с помощью разработанной программы.
4. Дать интерпретацию полученным результатам.

***Диффузия реагирующих химических веществ описывается системой уравнений
в частных производных относительно концентраций всех рассматриваемых веществ,
содержащих диффузионные члены и члены, описывающие химическую реакцию.***

#### **5. Задача Стефана для уравнения теплопроводности**

В процессе изменения температуры тела может происходить изменение его агрегатного состояния. В частности, при переходе температуры через точку плавления происходит переход вещества из твердой фазы в жидкую при плавлении или обратный переход из жидкой фазы в твердую фазу при затвердевании[[8]](#endnote-8). При этом происходит изменение со временем границы раздела фаз, причем на самой границе неизменно поддерживается температура плавления (затвердевания), а также происходит выделение скрытой теплоты плавления (затвердевания). Рассматриваемый процесс описывается задачей Стефана для уравнения теплопроводности[[9]](#endnote-9). Мы ограничимся исследование пространственно одномерного случая.

Пусть имеется достаточно длинный кусок льда. С левого конца *x=*0 подводится некоторый поток тепла *q*, который можно считать постоянным. Вследствие этого лед плавится так что в некоторой окрестности левой границе образуется вода, причем область, занятая водой меняется со временем. Положение границы раздела жидкой и твердой фазы в момент времени *t* обозначается через *ξ*(*t*). Цель исследования состоит в определении закона изменения подвижной границы, т.е. функции *ξ*.

Итак, в момент времени *t* вода располагается в области 0<*x*<*ξ*(*t*). Распределение температуры воды там характеризуется уравнением теплопроводности

  (11.22)

где *u –* температура воды, *c –* ее теплоемкость, *ρ –* плотность, *λ –* теплопроводность.

Как уже отмечалось, на левом конце задан тепловой поток *q*. В принципе, тепловой поток определяется как произведение коэффициента *λ* на производную от функции *u* по пространственной переменной. В результате получаем граничное условие

  (11.23)

Знак минус в левой части равенства объясняется тем, что вода на левом конце нагревается, а значит ее температура является убывающая функция пространственной переменной.

На правом конце рассматриваемого участка, т.е. на границе раздела фаз задается постоянная температура плавления льда, которая равна нулю. Тем самым получается граничное условие

  (11.24)

Состояние системы в начальный момент времени можно считать известным. Таким образом, справедливо начальное условие

  (11.25)

где *u*0 *–* начальное распределение температуры. Исходя из физического смысла задачи следует, что *u*0 является убывающей функцией, причем *u*0(*ξ*(0))=0 в силу равенства (11.24). Использование условия (11.25) предполагает известным начальное положение *ξ*0 подвижной границы. Тем самым имеется еще дополнительное начальное условие

 *ξ*(0) = *ξ*0. (11.26)

Если бы закон движения подвижной границы был известен, то имеющихся соотношений было бы достаточно для нахождения распределения температур. Однако в отсутствии информации о функции *ξ* для решения задачи требуется задание дополнительного условия.

В момент времени *t* граница находится в точке *ξ*(*t*), а в момент времени *t+*Δ*t* – в точке *ξ*(*t+*Δ*t*). Если за это время растаяло количество вещества *m*, то для этого понадобилось количество тепла

*Q*1 *= χm*,

где *χ* – скрытая теплота плавления льда. За время от *t* до *t+*Δ*t* область, заполненная водой увеличилась на *ξ*(*t+*Δ*t*)–*ξ*(*t*). Учитывая, что плотность *ρ* представляет собой количество вещества, приходящаяся на единицу длины, заключаем, что масса будет равна

*m* =*ρ*[*ξ*(*t+*Δ*t*)–*ξ*(*t*)].

Таким образом, для того, чтобы растопить лед за время от *t* до *t+*Δ*t* требуется затратить количество тепла

 *Q*1 *= χm* =*χρ*[*ξ*(*t+*Δ*t*)–*ξ*(*t*)]. (11.27)

Полученное тепло образовалось за счет поступающего теплового потока. Как известно, тепловой поток есть количество тепла, проходящее в единицу времени через данную точку. Тогда если в данную точку поступает тепловой поток *q*, то за время Δ*t*, туда поступает количество тепла

*Q*2 *= q*Δ*t*.

Тепловой поток, приходящий в точку *ξ*(*t*) слева за время Δ*t*, равен

  (11.28)

Тепловой баланс в области таяния льда на рассматриваемом интервале времени характеризуется равенством *Q*1 *= Q*2. Тогда из соотношений (11.27), (11.28) следует



Разделив полученное равенство на Δ*t* и переходя в нем к пределу при Δ*t*→0, будем иметь

  (11.29)

Соотношение (11.29), называемое ***условием Стефана***, совместно с начальным условием (11.26) характеризует искомую функцию *ξ*.

Итак, для нахождения закона движения подвижной границы, а заодно и также неизвестное распределение температуры в жидкой фазе получаем соотношения (11.22) – (11.26), (11.29), составляющие ***задачу Стефана*** для уравнения теплопроводности или более полно ***однофазную задачу Стефана***[[10]](#endnote-10).

***Процесс переноса тепла при условии фазового перехода характеризуется
задачей Стефана для уравнения теплопроводности,
включающей в себя условие Стефана на подвижной границе.***

**Направление дальнейшей работы**. Ознакомившись с математическими моделями процессов переноса, мы обращаемся в следующей лекции к волновым процессами, описывающим механические, электрические и другие типы колебаний протяженных объектов. Получаемые при этом системы с распределенными параметрами описываются другим типом уравнений с частными производными и являются обобщениями рассмотренных в Главе 3 и Главе 4 механических и электрических колебаний для систем с сосредоточенными параметрами.

### **ПРИЛОЖЕНИЯ**

В Приложении развиваются идеи, описанные в основной части лекции. В частности, в предшествующей лекции было установлены, что качественно разные процессы переноса тепла и вещества описываются одним и тем же уравнением в частных производных. В данной лекции мы убедились, что процесс распространения товаров также характеризуется этим уравнением. Ниже будет представлена общая схема вывода уравнения переноса и рассмотрены другие явления природы и общества, также описываемые этим уравнением.

Мы уже отмечали, что точное решение уравнения в частных производных удается найти лишь в исключительных случаях. Ранее был описан метод конечных разностей для решения краевой задачи для уравнения теплопроводности. Однако используемая при этом явная разностная схема применима при достаточно ограничительном условий на параметры алгоритма. Ниже будет описана неявная схема для решения той же задачи, являющаяся абсолютно устойчивой.

Выше была рассмотрена математическая модель химической реакции в условиях, когда реагирующие вещества неравномерно распределены по заданной области. Она сочетает в себе выражения, описывающие ход химической реакции и диффузию веществ, участвующих в реакции. Аналогичным образом может быть рассмотрен процесс миграции двух конкурирующих биологических видов по некоторой территории. В ее основе лежит уравнение миграции вида, описываемая уравнением типа теплопроводности, дополненное членами, характеризующими явление биологической конкуренции.

Аналогичная идея используются в заключительном разделе Приложения, где описывается модель развития опухоли в условиях гормонорезистентности. Она описывает изменение со временем опухолевой ткани под действием гормональной терапии в случае привыкания опухолевых клеток к действию антибиотика. При этом, с одной стороны, изменение размеров опухоли в некотором смысле аналогично объема льда в процессе таяния и характеризуется условием типа Стефана. А, с другой стороны, явление гормонорезистентности в определенной степени аналогично антибиотикорезистентности, рассмотренной в Главе 7.

#### **6. Обзор процессов переноса**

С математической точки зрения явления теплопроводности, диффузии и перевозки товара оказываются чрезвычайно близкими, хотя их природа существенно различна. Во всех трех случаях исследуется процесс переноса некоторой субстанции (тепла, вещества, товара), которую называют ***мерой***. Мера является глобальной характеристикой объекта исследования и выражает количество рассматриваемой субстанции, содержащейся в определенной области[[11]](#endnote-11).

Локальной характеристикой объекта является ***функция состояния*** *u* (температура, концентрация, плотность товара), фактически определяющая меру единицы длины данной области[[12]](#endnote-12). Тогда использованная ранее формула



задает изменение меры участка [*x*,*x*+Δ*x*] за время от *t* до *t*+Δ*t*. Отметим, что мера определяется интегралом[[13]](#endnote-13) от функции состояния.

Функция состояния изначально распространена неравномерно по данной области. В силу некоторых причин (своих для каждого конкретного случая, см. ниже) существует тенденция к выравниванию функции состояния, что и определяет ход динамических процессов. В этой связи возникает ***поток меры*** (тепловой, диффузионный, товаров), характеризующий количество рассматриваемой субстанции, проходящей в единицу времени, через данную точку[[14]](#endnote-14). Поток меры пропорционален скорости изменения функции состояния в направлении оси *х*, т.е. производной от искомой функции[[15]](#endnote-15). В качестве коэффициента пропорциональности здесь выступает некоторый ***равновесный коэффициент*** *D* (теплопроводности, диффузии, переноса товара), являющийся параметром процесса и характеризующий интенсивность переноса рассматриваемой субстанции (тепла, вещества, товара) в данной среде. При этом получается некоторый ***равновесный закон*** (Фурье, Фика и т.п.), устанавливающий связь между потоком и функцией состояния и выражающий стремление данной системы к равновесному состоянию. В результате определяется изменение меры



в данной пространственно-временной области под действием соответствующих потоков. характеризуется величиной

Рассмотренные ранее уравнения состояния системы (теплопроводности, диффузии, переноса товара) выводятся на основе ***закона сохранения*** ***меры*** на участке [*x*,*x*+Δ*x*][[16]](#endnote-16) за время от *t* до *t*+Δ*t*, характеризуемого равенством *Q*1 = *Q*2. Последнее соотношение преобразуется с помощью теоремы о среднем и предельного перехода, при котором указанная область сжимается в точку. В результате получается ***уравнение переноса*** (теплопроводности, диффузии, переноса товара)

 *ut* = *Duxx*.

Сравнительная характеристика различных процессов переноса приводится в Таблице 11.1.

Таблица 11.1. Сравнительная характеристика процессов переноса.

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| **процесс** | **теплоперенос** | **диффузия** | **перенос товара** |
| мера | количества тепла | масса | количества товара |
| функция состояния | температура | плотность | плотность товара |
| поток меры | тепловой поток | диффузионный поток | поток товара |
| равновесный закон | Фурье | Фика |  |
| равновесный коэффициент | коэффициент теплопроводности | коэффициент диффузии | коэффициент переноса товара |
| закон сохранения меры | закон сохранения количества тепла | закон сохранения масса | закон сохранения количества товара |
| уравнение переноса | уравнение теплопроводности | уравнение диффузия | уравнение переноса товара |

Рассмотренные процессы характеризуются тем, что вследствие неравномерности распределения функции состояния в данной области возникают потоки, за счет которых система постепенно стремится к равновесному состоянию. Попытаемся оценить механизм этого явления в различных интерпретациях.

Смысл явления теплопроводности, грубо говоря, состоит в следующем. Температура тела связана с кинетической энергией молекул, а значит, с их скоростями. В процессе движения молекулы сталкиваются и обмениваются энергией. При этом существенно более вероятной представляется та ситуация, при которой быстрая молекула передает часть энергии более медленной молекуле при их соударении, чем наоборот[[17]](#endnote-17). В результате быстрые молекулы замедляются, а медленные – ускоряются. Тем самым наблюдается постепенное выравнивание скоростей молекул, а значит, и их энергии. На макроскопическом уровне мы наблюдаем остывание более теплых участков тела и нагрев его более холодных участков. Таким образом, возникают тепловые потоки, приводящие к перераспределению температуры, см. Рис. 11.1.



Рис. 11.1. Возникновение теплового потока.

При исследовании явления диффузии на микроскопическом уровне мы вновь имеем дело с движением молекул. В области с высокой концентрацией содержится большее число молекул. Естественно, ***длина свободного пробега молекулы***, т.е. расстояние, проходимое молекулой между двумя соударениями, будет тем больше, чем меньше молекул может встретиться на ее пути. Таким образом, в единицу времени из области с высокой концентрацией вещества в область, где концентрация сравнительно мала, скорее всего перейдет больше молекул, чем в противоположном направлении. Тем самым наблюдается диффузионный поток, за счет которого происходит выравнивание концентрации газа в данном объеме см. Рис. 11.2.



Рис. 11.2. Возникновение диффузионного потока.

Перенос товара имеет естественное объяснение. Если в некоторой области имеется достаточно много товара, то там он едва ли будет пользоваться большим спросом. А вот там, где его мало, можно ожидать большего спроса на товар. В этой связи вероятнее всего коммерсанты повезут товар из области, где он в избытке, в область, где наблюдается его дефицит.

Описанные явления не исчерпывают класс процессов переноса. В частности, к явлению диффузии достаточно близки процессы фильтрации жидкости или газа через пористое тело[[18]](#endnote-18) и диффузия нейтронов в ядерном реакторе[[19]](#endnote-19).

Рассмотрим теперь некоторую электропроводящую среду, в которое неравномерно распределены какие-то заряды. В области с высокой плотностью заряда в соответствии с ***законом Кулона*** будут действовать значительные силы отталкивания, стремящиеся развести заряды в разные стороны. Естественно, наибольшее влияние этих сил будет в том направлении, где плотность заряда минимальна, поскольку там будут действовать сравнительно небольшие силы отталкивания. Таким образом, наблюдается поток зарядов, определяющий явление электропроводности[[20]](#endnote-20). Близкие явления связаны с движением электронов и дырок в кристаллической решетке полупроводника[[21]](#endnote-21).

К числу процессов переноса относится и движение жидкости[[22]](#endnote-22). Молекулы жидкости движутся с различными скоростями. В процессе их соударения происходит обмен импульсами. В результате более быстрые слои жидкости замедляются, а более медленные – ускоряются, что связано с вязкостью жидкости. На макроскопическом уровне наблюдается постепенное выравнивание скоростей движения различных ее слоев.

Своеобразным процессом переноса является миграция биологического вида. Предположим, что некоторый вид распределен неравномерно по какой-либо территории. Тогда его численность оказывается не одинаковой в разных областях. В силу ограниченности пищи наблюдается перемещение животных из области с высокой численностью вида, где наблюдается острая конкурентная борьба за пищу, в зону, где численность вида относительно мала, и больше шансов найти себе пропитание. В результате наблюдаются "поток вида", вследствие которого вид постепенно распространяется по всей территории. Это распределение будет равномерным, если вся рассматриваемая область обладает одинаковыми запасами пищи и другими условиями проживания биологического вида. Ниже мы рассмотрим процесс миграции двух конкурирующих видов, неравномерно распределенных по территории[[23]](#endnote-23).

К описанному выше явлению близок процесс миграции населения. Естественно, причиной рассредоточения населения будет не только нехватка пищи на ограниченной территории, но и различного рода социальные факторы.

При изучении процесса распространения информации роль "взаимодействующих частиц" играют люди, существенно различающиеся между собой по степени информируемости, т.е. по плотности информации – количеству информации, имеющейся у данного человека. В процессе взаимодействия людей происходит обмен информацией, в результате чего уровень информируемости выравнивается. Здесь, правда, следует иметь в виду, что при обмене информацией информируемость источника не уменьшается. Однако в силу повышения уровня информируемости слабо информируемых людей в рассматриваемой системе постепенно устанавливается более равномерное распределение плотности информации. Система образования, средства массовой информации, научные конференции, шпионаж, распространение слухов и т.д. фактически представляют собой определенные формы переноса информации.

В определенной степени к явлениям переноса следует отнести и социальную борьбу населения. Различные слои населения могут существенно различаться по своим доходам. Возникает соблазн проведения перераспределения этих доходов – к изъятию излишков средств у более богатых и передаче их беднякам. На более мягком уровне эту задачу решает государственная социальная политика (прогрессивный налог, социальная помощь малоимущим, пособия по безработице и т.д.). Иногда выравнивание доходов населения и осуществляется насильственным путем – с помощью социальной революции. Отметим, что в модели социальной борьбы в качестве распределенной координаты используется не пространственная переменная, а слои населения. В частности, функцией состояния системы здесь можно считать доходы населения, которые меняются от человека к человеку и со временем.

С процессами переноса связано функционирование рынка капитала.Различные предприниматели могут вкладывать имеющиеся у них средства в те или иные предприятия и сферы услуг. Если, к примеру, окажется, что большое число предпринимателей занимаются выпуском холодильников, а малое – стиральных машин, то со временем выяснится, что холодильники на рынке будут в избытке, а стиральные машины – в дефиците. В этих условиях многие предприниматели сочтут для себя выгодным перепрофилировать свои предприятия на выпуск стиральных машин в надежде получить более высокие доходы за счет реализации товара, пользующегося повышенным спросом. Таким образом, происходит постепенное выравнивание концентрации капитала.

Аналогичные явления наблюдается и на рынке труда. Если, например, дефицитной оказывается специальность дворника, в то время как потребность в бизнесменах остается сравнительно низкой, то дворникам предоставляются достаточно высокие оклады, тогда как среди бизнесменов наблюдается значительная безработица. В результате появляется всё больше желающих сделаться дворниками и всё меньше – бизнесменами. Тем самым рассматриваемая система стремится к равновесному состоянию.

Обратимся теперь к процессу ценообразования. Предположим, что на какой-либо товар различные предприниматели назначают разную цену. Естественно, те из них, у кого цена оказалась слишком высокой, не смогут сбыть свою продукцию. Во избежание разорения они вынуждены снизить цену. С другой стороны, у предпринимателя, назначившего не слишком большую цену, товар быстро раскупается. Тогда с целью получения более высоких доходов хитрый предприниматель повышает цену. Таким образом, происходит постепенное выравнивание цен на данный товар у различных предпринимателей[[24]](#endnote-24).

Естественно, перечисленные примеры далеко не исчерпывают обширный список процессов переноса[[25]](#endnote-25).

#### **7. Метод конечных разностей. Неявная схема**

Для приближенного решения краевых задач для уравнения теплопроводности мы уже использовали метод конечных разностей. Однако приведенная ранее явная разностная схема является условно устойчивой. Вследствие этого для ее практического применения приходится выбирать чрезвычайно малым шаг по времени, что зачастую приводит к чрезмерно большому объему вычислений. В этой связи на практике часто применяют другой алгоритм.

Вернемся к исследованию первой краевой задачи для уравнения теплопроводности. Итак, дана краевая задача

*ut*(*x*,*t*) = *a*2*uxx*(*x*,*t*) + *f*(*x*,*t*), 0<*x*<*L*, *t* >0,

*u*(*x*,0) = *ϕ*(*x*), 0<*x*<*L*,

*u*(0,*t*) = *α*(*t*),  *u*(*L*,*t*) = *β*(*t*), *t* >0,

где параметры *a* и *L* и функции *f*, *ϕ*, *α* и *β* известны.

Как и в случае явной разностной схемы в рассматриваемой области вводится сетка, характеризуемая точками (*xi*,*tj*), где *xi =hi*, *i=*0,…,*M*, *tj =τj*, *j=*0,…,*N*. Здесь, как и раньше, шаги по времени и пространственной переменной определяются равенствами *τ* = *T*/*N*, *h* = *L*/*M*, где *T* конечный момент времени. В уравнении теплопроводности производится аппроксимация входящих в него производных с помощью известных формул численного дифференцирования. Единственное отличие состоит в том, что выражение, аппроксимирующее вторую производную выбирается не на предыдущем, а на последующем временном слое. В результате получаются следующие соотношения:

  (11.30)

  (11.31)

  (11.32)

где остаются в силе все принятые ранее обозначения. Равенство (11.30) называется ***неявной разностной схемой*** для уравнения теплопроводности. Можно убедиться, что эта схема является ***абсолютно устойчивой***, т.е. в процессе счета от слоя к слою по времени погрешности здесь не накапливаются. Тем самым значения шагом алгоритма можно выбирать исключительно из соображений желаемой точности, не принимая во внимание условие устойчивости (11.15), применяемое для явной разностной схемы.

Было бы удивительно, если бы указанное преимущество не сопровождалось каким-то недостатком. Действительно, если из явной схемы (11.11) следует рекуррентная формула (11.14), позволяющая явным образом вычислять значения искомой сеточной функции от слоя к слою, то в соотношении (11.30) на неизвестном последующем временном слое неизвестны три значения искомой функции, соответствующие пространственным индексам *i-*1, *i* и *i+*1. Тем самым на каждом шаге по времени получаем систему линейных алгебраических уравнений. К счастью каждое уравнение этой системе, кроме граничных, соответствующих условию (11.32), включают в себя лишь три неизвестных величины[[26]](#endnote-26). Это обстоятельство позволяет найти ее решение, не используя общие методы решения систем линейных алгебраических уравнений, требующих большого объема вычислений при достаточно больших значениях числа точек *M*.

Обозначим  Тогда на шаге *j+*1 по времени требуется решить систему уравнений

 *yi-*1 + *Ayi* + *yi+*1 = *bi*, *i =* 1,…,*M–*1, (11.33)

 *y*0 = *b*0, *yM+*1 = *bM+*1, (11.34)

где



В соответствии с ***методом прогонки*** предполагает, что два соседних неизвестных значения связаны равенством[[27]](#endnote-27)

 *yi* = *pi+*1*yi+*1 + *qi+*1, *i =M–*1*,M–*2*,*…,0. (11.35)

Для нахождения неизвестных параметров *pi+*1 и *qi+*1 из равенства (11.35) определяем значение *yi-*1 и подставляем результат в равенство (11.33). Получаем

*piyi*+ *qi* + *Ayi* + *yi+*1 = *bi*.

Записывая это равенство в виде

**

и сравнивая результат с формулой (1.35), получаем рекуррентные формулы для нахождения прогоночных коэффициентов

 ** (11.36)

Для использования полученных формул требуется определить эти параметры при *i=*1. Из формулы (11.35) при *i=*0 получаем

*y*0 = *p*1*y*1 + *q*1 = *b*0

в силу первого равенства (11.34). Последнее соотношение будет справедливо при выполнении равенств

 *p*1 = 0, *q*1 = *b*0. (11.37)

В результате мы получаем следующий алгоритм для решения системы (11.33), (11.34):

1. По формулам (11.37) определяются первые значения прогоночных коэффициентов.
2. Из формул (11.37) находятся все значения прогоночных коэффициентов (прямая прогонка).
3. Из второго равенства (11.34) находится последнее значение искомой величины.
4. По формуле (11.35) определяется решения задачи (11.33), (11.34), от предпоследнего до первого (обратная прогонка).

Итак, у нас есть алгоритм нахождения искомой сеточной функции на последующем временном слое, а значит, и приближенного решения первой краевой задачи для уравнения теплопроводности на основе неявной разностной схемы[[28]](#endnote-28). Аналогичным образом могут быть решены и другие краевые задачи для уравнений в частных производных[[29]](#endnote-29).

**Задание 11.5. Неявная разностная схема для уравнения теплопроводности**. Рассматривается та же для первая краевая задачи уравнения теплопроводности (11.8) – (11.10), что и в Задании 11.2. Провести следующий анализ.

1. Подобрать точное решение задачи, как это делалось в Задании 11.3, с соответствующими значениями функций, входящих в правые части уравнения и краевых условий.
2. Записать алгоритм решения этой задачи на основе неявной разностной схемы и метода прогонки, а также по явной разностной схеме, см. Задание 11.3.
3. Составить программу для решения задачи указанными алгоритмами.
4. Провести расчеты вы условиях нарушения устойчивости явной разностной схемы.
5. Сравнить результаты расчетов обеими методами между собой и с точным решением задачи.

#### **8. Миграция конкурирующих видов**

В Главе 7 рассматривались задача о конкуренции двух биологических видов, потребляющих одну и ту же пищу. В данном случае конкурирующие неравномерно распределены по некоторой территории, для простоты характеризуемой одномерной областью. Состояние системы здесь характеризуется плотностями рассматриваемых видов, т.е. их численностью, приходящейся на единицу длины. Тогда изменение плотности видов происходит как за счет их миграции из области, где плотность вида велика, в сравнительно не населенную область, так и в силу межвидовой конкуренции[[30]](#endnote-30). Полученная математическая модель сочетает в себе особенности уравнений типа диффузии, характеризующих миграцию видов по данной территории и уравнений конкуренции, описывающих межвидовые взаимодействия. В результате получаем следующую систему уравнений



где *ui* – плотность *i*-ого вида, *Di* – коэффициент его миграции, *ai* – удельный прирост *i*-ого вида, *qi*– потребление пищи *i*-ым видом, *di –* эффективный прирост *i*-ого вида *i* = 1,2, см. Лекция №7. Распределения плотности видов по данной территории в начальный момент времени, а также на границе заданной области считаются известными[[31]](#endnote-31).

**Задание 11.6. Численное решение уравнений миграции конкурирующих видов**. Рассматривается первая краевая задача для приведенных выше уравнений. Следует выполнить следующие действия.

1. Провести аппроксимацию поставленной задачи в соответствии с методом конечных разностей с использованием неявной разностной схемы.
2. Разработать алгоритм решения задачи с использованием метода прогонки.
3. Составить компьютерную программу в соответствии с разработанным алгоритмом.
4. Провести расчеты исследуемой системы с помощью разработанной программы.
5. Дать интерпретацию полученным результатам.

#### **9. Гормональное лечение опухоли с учетом гормонорезистентности**

Мы уже рассмотрели математические модели диффузии при реакции синтеза и миграции конкурирующих биологических видов, являющиеся распределенными аналогами исследованных ранее моделей конкретной химической реакции и взаимодействия двух биологических видов. В обоих случаях при построении уравнений состояния мы брали за основу модель соответствующего процесса переноса, дополненную членами, описывающими взаимодействие рассматриваемых объектов. Приведем еще один пример математической модели подобной структуры. Речь идет о гормональном лечении некоторых форм рака и возникающем при этом явлении гормонорезистентности[[32]](#endnote-32).

Мы рассматриваем развитие опухоли, которая постепенно увеличивается в объеме под влиянием определенных факторов. Таковыми могут некоторые виды гормонов, присутствующих в организме. Здесь имеется определенный аналог с постепенным замерзанием воды в условиях низкой температуры.

Для лечения указанных типов рака применяют гормонотерапию, при которой под действием лекарственных средств сокращается выработка соответствующих гормонов. Таким способом удается замедлить рост опухоли или даже добиться ее сокращения в объеме. Аналогично за счет нагрева можно замедлить замерзание воды или даже добиться таяния образовавшегося льда. Процесс увеличения опухоли под влиянием стимулирующего фактора и ее уменьшения за счет подавления этого фактора может в некотором смысле описан с помощью рассмотренной ранее задачей Стефана.

Известно, что со временем эффективность гормонального лечения может снизиться вследствие ростом числа раковых клеток, устойчивых к действию применяемых лекарственных средств. Это явление, называемое гормонорезистентностью, в определенном смысле аналогично явлению привыкания бактерий к действию антибиотиков, описанному в Главе 7. Отталкиваясь от задачи Стефана для описания изменения опухоли в размерах и от модели антибиотикорезистентности для описания снижения эффективности гормонального лечения можно попытаться построить математическую модель рассматриваемого процесса.

Рассматриваются два типа раковых клеток, чувствительных и устойчивых к действию гормонального лечения. Состояние системы будем характеризовать функциями *us = us*(*x*,*t*) и *ur = ur*(*x*,*t*), описывающими концентрации указанных типов клеток в соответствующей точке в указанный момент времени. Распространение этих клеток в пространстве будим характеризовать соответствующими потоками, а значит, диффузионными членами. Оба типа клеток обладают некоторым естественным приростом, который сдерживается ограниченностью жизненного пространства, общего для всех клеток. Вследствие этого в соответствующих уравнениях появляются слагаемые, характерные для модели конкуренции. Кроме того, мы учитываем возможность переходов от одних типов клеток к другим. Наконец, имеется еще влияние лекарственного препарата, подавляющего размножение чувствительных клеток и не влияющего на устойчивые клетки[[33]](#endnote-33).

Для простоты ограничимся рассмотрением пространственно одномерного случая[[34]](#endnote-34). При этом левый конец отрезка фиксирован. Здесь находится очаг возникновения опухоли и задаются потоки, аналогичные притоку или отводу тепла извне в задаче Стефана, см. условие (11.33). Правый конец соответствует внешней границе опухоли, а значит, характеризуется нулевой концентрацией раковых клеток. Поскольку состояние системы меняется со временем, то положение этой границе меняется со временем. Для определения закона движения границы *ξ = ξ*(*t*) записывается условие типа Стефана. Начальное распределение раковых клеток, а значит, и начальное положение подвижной границы считаются известными.

В результате получается следующая математическая модель исследуемого процесса

 





****

****

где *Ds* и *Dr* являются коэффициентами диффузии чувствительных и резистентных раковых клеток, *as* и *ar* – их приросты, *bs* и *br* – снижения их прироста за счет ограниченности жизненного пространства, а *crs* и *csr* – частоты межтиповых переходов клеток. При этом  определяет дозу гормонального препарата в данный момент времени, а *θ* – его интенсивность[[35]](#endnote-35).

Отметим некоторые дополнительные ограничения для рассматриваемой модели. Равенства *us*0(*ξ*0)=0, *ur*0(*ξ*0)=0 означают, что начальная концентрация обоих типов клеток на правой границе равна нулю, что соответствует начальной границы опухоли. Неравенство  означает, что в системе изначально преобладают чувствительные клетки. Условие  говорит о том, что в отсутствии лечения чувствительные клетки являются более жизнеспособными. Кроме того, коэффициенты *Ds* и *Dr* считаются достаточно малыми, т.е. рост опухоли является достаточно медленным. Достаточно малы и параметры *crs* и *csr*, т.е. межтиповые переходы являются сравнительно редкими. Расчеты показывают, что при определенном сочетании параметров представленная модель описывает рост опухоли при естественным течении процесса, сокращение роста и даже уменьшение опухоли в размерах под действием гормонального лечения за счет уменьшения концентрации чувствительных клеток, снижение эффективности гормонального лечения в виду роста концентрации резистентных клеток, восстановление концентрации чувствительных клеток и снижение концентрации резистентных клеток в случае прекращения лечения[[36]](#endnote-36).

### **КОММЕНТАРИИ**

1. О теории подобия см. Gukhman, KlineS. [↑](#endnote-ref-1)
2. Фактически мы уже пользовались теорией подобия при анализе модели «хищник–жертва», см. Лекция № 7. [↑](#endnote-ref-2)
3. О методе конечных разностей см. Morton, Randall, Samarskii, Smith, Strikwerda, Thomas. [↑](#endnote-ref-3)
4. Вывод формул численного дифференцирование основан на разложении функции в ***ряд Тейлора***. Пусть имеется некоторая функция *g=g*(*x*), обладающая должным числом производных. Тогда имеем место ее представление в виде

 **. (11.)

В частности, отсюда следует равенство

**

где величина  имеет более высокий (второй) порядок малости чем *h*, т.е. характеризуется тем, что  при *h*→0. Отсюда следует, формула

**

при достаточно малых значениях *h*. В результате мы получили использованную ранее формулу для приближенного вычисления первой производной. Поскольку отбрасываемая величина имеет первый порядок малости относительно *h*, говорят, что приведенная формула имеет ***первый порядок аппроксимации***.

Для получения формулы для вычисления второй производной учитываем три члена в правой части равенства (11.). Получаем

**

где последнее слагаемое в правой части имеет более высокий (четвертый) порядок малости, чем *h*3. Нас интересует не его конкретное значение, а лишь его порядок малости. В ниже следующих формулах под  будет пониматься различные величины, имеющие тот же порядок малости. Заменяя здесь *h* на – *h*, будем иметь

**

причем последнее слагаемое в правой части здесь не то же самое, а того же самого порядка, что и соответствующее слагаемое в правой части предыдущего равенства. В результате сложения этих соотношений будем иметь

**.

Отсюда следует

**

В результате мы получаем используемую в методе конечных разностей формулу для приближенного вычисления второй производной. При этом, поскольку отбрасываемая величина здесь имеет второй порядок малости относительно *h*, говорят, что данная формула имеет ***второй порядок аппроксимации***. Естественно, чем выше порядок аппроксимации, тем точнее формула для вычисления производной. [↑](#endnote-ref-4)
5. Явная разностная схема имеет первый порядок аппроксимации по времени и второй порядок аппроксимации по пространственной переменной в силу используемых порядков аппроксимации производных, входящих в уравнение теплопроводности. [↑](#endnote-ref-5)
6. Предположим, что рассматривается уравнение теплопроводности (11.2) с начальным условием (11.3) и граничными условиями второго рода

*ux*(0,*t*) = *α*(*t*),  *ux*(*L*,*t*) = *β*(*t*), *t* >0.

Для решения полученной краевой задачи можно использовать явную разностную схему (11.5) с формулой (11.6) для нахождения сеточной функции на нулевом временном слое. Заменяем в приведенных выше граничных условиях первую производную на границах ее соответствующими аппроксимациями. Получаем

**

В результате приходим к формулам

**

Теперь получаем следующий алгоритм приближенного решения второй краевой задачи. Сначала по формуле (11.6) находится искомая сеточная функция на нулевом временном слое. Предположим теперь что ее значение на *j-*ом временном слое известно. Тогда из основной расчетной формулы (11.8) находятся все значения  на последующем временном слое, начиная со значения *i=*1 и кончая *i=M*-1. После этого из приведенных выше равенств определяются граничные значения

**

В результате все значения на последующем временном слое будут известными, и можно переходит к нахождению решения задачи на новом слое по времени. Отметим, что, поскольку для аппроксимации граничных условий мы пользовались формулами первого порядка точности, описанная схема решения второй краевой задачи для уравнения теплопроводности имеет первый порядок аппроксимации как по времени, так и по пространственной переменной. [↑](#endnote-ref-6)
7. Для оценки недостатка явной разностной схему в связи с наличием условия устойчивости рассмотрим частный случай решаемой задачи. Предположим, что решается задача при *a=*1, *L=*1, *T*=1. Пусть нас вполне удовлетворяет решение задачи с шагом по пространственной переменной *h=*0.1. Тогда из соображений устойчивости следует выбрать значение шага по времени *τ*≤*h*2/2. Тем самым максимально допустимый шаг по времени будет равен 0.005. Следовательно, при выборе 10 точек по пространственной переменной в единичном квадрате нам потребуется выполнить 200 шагов по времени. Если же мы захотим более точные результаты, выбрав значение шага *h=*0.01, то придется выбирать шаг по времени 0.00005, т.е. выполнять 20000 шагов по времени. Таким образом, использование явной разностной схемы в области сравнительно больших размеров приводит к чрезвычайно большому объему вычислений. В этой связи вместо явной схемы часто применяют более сложные, но более эффективные неявные схемы, см. Приложение. [↑](#endnote-ref-7)
8. Аналогично, при переходе температуры через точку кипения происходит переход вещества из жидкой фазы в газообразную при кипении или обратный переход из газообразной фазы в жидкую фазу при конденсации. [↑](#endnote-ref-8)
9. Задача Стефана рассматривается в Andreucci, Gupta, Meirmanov, Rubinshtein. [↑](#endnote-ref-9)
10. ***Двухфазная задача Стефана*** предполагает рассмотрение обеих фаз рассматриваемого вещества, т.е. в данном случае воды и льда. Вторая фаза характеризуется уравнением теплопроводности в области правее подвижной границы. [↑](#endnote-ref-10)
11. В анализе ***мерами*** принято называть функции множества, обладающие следующими свойствами. Мера всегда неотрицательна. Мера пустого множества равна нулю. Мера аддитивна, т.е. мера объединения двух непересекающихся множеств равна сумме их мер. Естественно, используемое выше понятие меры отвечает всем этим свойствам. Отметим также, что понятие меры неизменно связано с операцией интегрирования. Общая теория меры излагается, например, в Halmos. [↑](#endnote-ref-11)
12. В двумерном случае функция состояния (например, концентрация) характеризует меру (например, массу) единицы площади, а в трехмерном – единицы объема. [↑](#endnote-ref-12)
13. В двумерном случае мера определяется поверхностным интегралом, а в трехмерном – объемным интегралом. [↑](#endnote-ref-13)
14. В двумерном случае поток определяет меру, проходящую за заданное время через элементарный отрезок, а трехмерном – через элементарное сечение. [↑](#endnote-ref-14)
15. В многомерном случае поток меры пропорционален градиенту функции состояния. [↑](#endnote-ref-15)
16. В двумерном случае закон сохранения меры характеризует изменение меры на элементарном участке поверхности за рассматриваемом интервале времени, а в трехмерном – в элементарном объеме. [↑](#endnote-ref-16)
17. Мы убеждаемся, что в основе теплопроводности (как и других процессов переноса) лежат вероятностные законы. В этой связи данные явления изучаются в рамках ***статистической физики***, см., например, LandauV, Reif, Rumer. [↑](#endnote-ref-17)
18. О фильтрации см. Matteson. [↑](#endnote-ref-18)
19. О диффузии нейтронов в ядерном реакторе см. Stacey. [↑](#endnote-ref-19)
20. Об электропроводности см. LandauE, Purcell, Sivuhin, Tamm. [↑](#endnote-ref-20)
21. О физике полупроводников см. Seeger. [↑](#endnote-ref-21)
22. Задачи гидродинамики рассматриваются в Главе 14. [↑](#endnote-ref-22)
23. Другие распределенные модели биологии рассматриваются, например, в Edelstein, Muller, Murray. [↑](#endnote-ref-23)
24. Другие распределенные модели экономики рассматриваются в Etheridge. Отметим также модель Блэка–Шоулза в финансовой математике, см. Black. [↑](#endnote-ref-24)
25. Уравнение теплопроводности находит также применение в ***дифференциальной геометрии***, см. Yu и в теории ***случайных процессов***, см. Jacobs. Отметим также, что рассматриваемое в Главе 15 уравнение Шрёдингера формально может быть записано в форме уравнения теплопроводности. [↑](#endnote-ref-25)
26. В этом случае матрица соответствующей системы линейных алгебраических уравнений является трехдиагональной. [↑](#endnote-ref-26)
27. Поскольку рассматриваемая система является линейной, естественно предположить, что любая пара неизвестных также будет связана некоторым линейным соотношением. С методом прогонки можно познакомиться в любой литературе по методу конечных разностей и методам вычислений в целом, см., например, Morton, Randall, Samarskii, Smith, Strikwerda, Thomas. [↑](#endnote-ref-27)
28. Неявная разностная схема, как и явная имеет первый порядок аппроксимации по времени и второй – по пространственной переменной. Для получения второго порядка аппроксимации как по пространственной, так и по временной переменной можно воспользоваться, например, ***схемой Кранка – Николсона***, см. Thomas. В ней вторая производная по пространственной переменной аппроксимируется в виде полусуммы аппроксимаций, применяемых в явной и неявной схемах. Тем самым получается соотношение



Схема Кранка – Николсона является шеститочечной (связывает шесть значений искомой функции) в отличие от четырехточечных явной и неявной схем. Однако для нахождения решения на последующем шаге по времени здесь также можно воспользоваться методом прогонки. Характерно, что эта схема также является абсолютно устойчивой. [↑](#endnote-ref-28)
29. Аналогичным образом может быть решена вторая краевая задача для уравнения теплопроводности, а также краевые задачи для обобщений этого уравнения, рассмотренные в предшествующей лекции. Отметим также, что для приближенного решения многомерного уравнения теплопроводности и других многомерных уравнений в частных производных применяют ***метод дробных шагов***, в которой переход от одного слоя по времени к другому осуществляется в несколько шагов, см. Yanenko. Среди других методов приближенного решения задач математической физики отметим также метод конечных элементов, см., например, Chaskalovic. [↑](#endnote-ref-29)
30. Математические модели миграции двух и более видов по территории при других формах межвидовых взаимодействий (см. Лекция № 7) получаются аналогичным способом, т.е. в модель вводятся члены, учитывающие как миграцию (аналог теплопроводности и диффузии), так и те, которые описывают данный тип межвидового взаимодействия, как в моделях хищник – жертва, ниши и симбиоза. [↑](#endnote-ref-30)
31. Если данная территория является изолированной от внешнего мира (например, остров), то следует использовать граничное условие второго рода – производная от плотности вида на границе равна нулю. [↑](#endnote-ref-31)
32. О явлении резистентности к лекарственным при лечении рака, в частности, о гормонорезистентности см.
Neidle. Математические модели роста опухоли приводится, например, в Kolobov, а лечения рака – в Brady, Liu, Nani. [↑](#endnote-ref-32)
33. При описании явления антибиотикорезистентности в Главе 7 мы рассматривали бактерицидный антибиотик, убивающий бактерии. Рассматриваемый тип гормонотерапии аналогичен бактериостатическим антибиотикам, которые не убивают бактерии, а подавляют их рождаемость. [↑](#endnote-ref-33)
34. Здесь точнее считать опухоль не линейным, а пространственным объектом. В частности, в простейшем случае, считая форму опухоли шарообразной, можно перейти к сферическим координатам. Воспользовавшись сферической симметрией, мы приходим к одной пространственной координате, характеризующей расстояние от данной точки до центра сферы. При этом условие Стефана будет задано на внешней поверхности сферы, положение которой меняется со временем. [↑](#endnote-ref-34)
35. Очевидно, при *f*(*t*) = 0 лечение отсутствует. При положительных значениях этой функции знаменатель соответствующей дроби оказывается больше единицы, а значит мы наблюдаем снижение прироста раковых клеток. [↑](#endnote-ref-35)
36. О численном анализе представленной модели см. SerovCanc. [↑](#endnote-ref-36)