УДК 519.633.6

Експоненціальна заміна у методі скінченних елементів для рівнянь адвекції-дифузії

Юлія Турчин

Львівський національний університет ім. І. Франка, вул. Університетська, 1, Львів, 79000, email: juliaturchyn@gmail.com

Розглянуто математичну модель процесу розповсюдження ліків у стінках судин при лікуванні атеросклерозу, що являє собою початково-крайову задачу для системи двох диференціальних рівнянь.В ході першого чисельного експерименту виявлено, що пряме застосування методу скінченних елементів зі стандартними лінійними та квадратичними базисними функціями призводить до втрати стійкості розв'язку. Це пов'язано зі специфікою вхідних параметрів задачі, а власне значною перевагою коефіцієнтів адвекції над коефіцієнтами дифузії. Недолік подолано шляхом використання апроксимацій на основі експоненціальної заміни у постановці задачі, що призводить до втрати адвективного доданку, а потім зворотної заміни у методі скінченних елементів та наведено результати обчислювального експерименту для одновимірної за просторовими змінними стаціонарної задачі.

Ключові слова:експоненціальна заміна, рівняння адвекції-дифузії, метод скінченних елементів, число Пекле.

Вступ. Математичне моделювання біохімічних процесів в організмі людини є актуальним напрямком наукових досліджень. Зокрема, числове дослідження математичної моделі, що описує процес розповсюдження ліків у стінці судини при лікуванні атеросклерозу, може допомогти оптимізувати процес лікування. Одним із актуальних способів лікування вищезгаданого захворювання є використання катетера для доставки ліків у зону ураження. Ліки являють собою сукупність наночастинок, кожна з яких містить в собі біоактивні речовини, які вивільняються в процесі адвекції-дифузії і здійснюють терапевтичний вплив.

1.Формулювання задачі

Розглянуто математичну модель, що описує процес розповсюдження ліків у стінках судин при катетерному лікуванні атеросклерозу[1]. Задача полягає в тому, що необхідно знайти такі C_1, C_2—невідомі концентрації ліків та інкапсульованих біоактивних речовин, відповідно, що задовольняють систему диференціальних рівнянь в області Ω:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial C_1}{\partial t} + \nabla\cdot(VC_1) - \nabla\cdot(K_1\cdot\nabla C_1) + \sigma_1 C_1 = 0; \\ \dfrac{\partial C_2}{\partial t} + \nabla\cdot(VC_2) - \nabla\cdot(K_2\cdot\nabla C_2) + \sigma_2 C_2 = C_1 f; \end{cases} \tag{1}$$

початкові умови в $\overline{\Omega}$:

$$C_1(x,0) = 0,\ C_2(x,0) = 0; \tag{2}$$

а також крайові умови на $\Gamma \times (0,T)$:

$$\begin{aligned} &n \cdot (K_1 \cdot \nabla C_1) + \lambda_1 (C_1 - C_{1,\infty}) = 0; \\ &n \cdot (K_2 \cdot \nabla C_2) + \lambda_2 (C_2 - C_{2,\infty}) = 0. \end{aligned} \tag{3}$$

У рівнянні (1) V — вектор адвективних швидкостей, K_1, K_2 — тензори дифузії, σ_1, σ_2 — коефіцієнти реакції, f — кількість інкапсульованих ліків на кожну наночастинку.

У зв'язку з тим, що рівняння зв'язані між собою лише присутністю невідомої концентрації ліків у правій частині другого рівняння, доцільним є розв'язувати кожне рівняння окремо по черзі. Отож, розглядатимемо окремо кожне рівняння, оскільки оператор в них є спільним і має вигляд:

$$Ac = \nabla \cdot \left(\overline{w} c \right) - \nabla \cdot \left(K \cdot \nabla c \right) + \sigma c.$$

Розглянемо рівняння виду:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + Ac = \tilde{f}, \tag{4}$$

$$\tilde{f} = \begin{cases} 0, i = 1; \\ C_1 f, i = 2. \end{cases}$$

з відповідними крайовими та початковими умовами.

Введемо деякий простір V:

$$V = \left\{ u(x) \in W_2^{(1)}(\overline{\Omega}),\ u = g \ на\ \Gamma_D \right\}.$$

Помножимо рівняння (4) та відповідну початкову умову на деяку функцію $u(x) \in V$ та інтегруємо в Ω [2]:

$$\int_\Omega \frac{\partial c}{\partial t} u d\Omega + \int_\Omega Acud\Omega = \int_\Omega \tilde{f} u d\Omega, \forall u \in V;$$

$$\int_\Omega (c(x,0) - c^0(x)) v d\Omega = 0.$$

Введемо позначення:

$$m(c,u)=\int\limits_{\Omega} cud\Omega;\ a(c,u)=\int\limits_{\Omega} Acud\Omega;\ l(u)=\int\limits_{\Omega} \tilde{f}ud\Omega;\ c'=\frac{\partial c}{\partial t}. \qquad (11)$$

Після застосування формули Остроградського до другого доданку білінійної форми $a(c,u)$, одержано варіаційне формулювання початково крайової задачі для рівняння адвекції-дифузії (1)-(3): знайти такі функції $c_i(x,t)\in L_2(0,T;V),\ i=1,2$, що задовольняють наступні інтегральні рівняння та початкові умови:

$$\begin{aligned} &m(c_i',u)+a(c_i,u)=l(u),\forall u\in V;\\ &m(c_i(x,0)-c_i^0,u)=0. \end{aligned} \qquad (11)$$

2. Експоненціальна заміна

В ході першого обчислювального експерименту[3] було встановлено, що стандартний підхід методу скінченних елементів з лінійним та квадратичним базисом не дає коректний результат наближення розв'язку, що пов'язано зі значною перевагою коефіцієнтів адвекції над коефіцієнтами дифузії. У цій статті пропонується модифікація методу скінченних елементів на основі застосування експоненціальної заміни у постановці задачі. Також варто зазначити, що кожне рівняння можна розв'язувати окремо, оскільки вони пов'язані лише присутністю невідомої концентрації наночастинок у правій частині другого рівняння.

Введемо наступну заміну [4]:

$$\begin{aligned} &C_1(x,y,z,t)=U_1(x,y,z,t)\exp\Big(\frac{1}{2K_1}\mathbf{rv}-\frac{t}{4K_1}\sum_{j=1}^{3}v_j^2\Big);\\ &C_2(x,y,z,t)=U_2(x,y,z,t)\exp\Big(\frac{1}{2K_2}\mathbf{rv}-\frac{t}{4K_2}\sum_{j=1}^{3}v_j^2\Big), \end{aligned} \qquad (5)$$

де:
$$\mathbf{r}=x\mathbf{i}+y\mathbf{j}+z\mathbf{k};\ \mathbf{v}=v_1\mathbf{i}+v_2\mathbf{j}+v_3\mathbf{k};\ \mathbf{rv}=xv_1+yv_2+zv_3.$$

Якщо застосувати заміну (5) до задачі (1)-(3), то це призведе до втрати адвективного доданку.Запропонований модифікований метод спочатку було апробовано на спрощеній тестовій задачі [5]:

$$\begin{cases} -K\dfrac{d^2c}{dx^2}+V_1\dfrac{dc}{dx}+\sigma c=f \quad on\ (a,b);\\ D_1\dfrac{dc}{dx}(a)+\lambda_1 c(a)=\psi_1;\\ D_2\dfrac{dc}{dx}(b)+\lambda_2 c(b)=\psi_2. \end{cases} \qquad (6)$$

Нехай:

$$c(x) = u(x)\exp(\frac{V_1}{2K}x); \tag{7}$$

Підставивши (7) у (6), одержуємо:

$$\begin{cases} -K\dfrac{d^2u}{dx^2} + Wu = f_1; \\ D_1\dfrac{du}{dx}(a) + \tilde{\lambda}_1 u(a) = \tilde{\psi}_1; \\ D_2\dfrac{du}{dx}(b) + \tilde{\lambda}_2 u(b) = \tilde{\psi}_2, \end{cases} \tag{8}$$

де, відповідно, коефіцієнти:

$$W = \frac{V_1^2}{4K} + \sigma;\ f_1 = f\exp(-\frac{V_1}{2K}x);\ \tilde{\lambda}_i = \lambda_i + \frac{D_i V_1}{2K};\ \tilde{\psi}_i = \psi_i \exp(-\frac{V_1}{2K}x).$$

Наведемо варіаційне формулювання для (8):

$$\int_a^b -K\frac{d^2u}{dx^2}vdx + \int_a^b wuvdx = \int_a^b f_1 vdx,\ \forall v \in\in V.$$

Застосуємо інтегрування частинами:

$$\int_a^b K\frac{du}{dx}\frac{dv}{dx}dx - K\frac{du}{dx}v\Big|_a^b + \int_a^b wuvdx = \int_a^b f_1 vdx \tag{9}$$

та введемо зворотну заміну в (9):

$$u(x) = c(x)\exp(-\frac{V_1}{2K}x).$$

Після поділу відрізка $[a,b]$ на скінченні елементи, побудуємо апроксимацію розв’язку (10) з лінійним базисом (11):

$$c_h(x) = c_{i-1}^h \varphi_{i-1}^h(x)\exp(-\frac{V_1}{2K}x) + c_i^h \varphi_i^h(x)\exp(-\frac{V_1}{2K}x); \tag{10}$$

$$\varphi_{i-1}^h = -\frac{x - x_i}{h};\ \varphi_i^h = \frac{x - x_{i-1}}{h}. \tag{11}$$

Введемо позначення:

$$(\xi_i^h, \varphi_j^h) \overset{df}{=} \int\limits_{x_{i-1}}^{x_i} (c_j^h (\xi_i^h)'(\varphi_j^h)' + w(\xi_i^h)(\varphi_j^h))dx,$$

де:

$$\xi_i^h = \varphi_i^h \exp(-\frac{V_1}{2K} x).$$

Одержимо головну СЛАР МСЕ:

$$\sum_{j=1}^{n} c_j^h (\xi_i^h, \varphi_j^h)_A = (f_1, \varphi_i^h) \quad i = 1, n.$$

+крайові умови

Варто зазначити, що інтеграли в матрицях мас та жорсткості було обраховано аналітично.

3. Результати числових експериментів

Для знаходження наближеного розв'язку (10) для задачі (8) було проведено кілька числових експериментів. Для цього було створено програмне забезпечення на основі технології .NET Windows Forms [6]та застосовано оптимізовані чисельні методи розв'язування системи лінійних алгебраїчних рівнянь.

Перший обчислювальний експеримент було проведено для різних сіток та числа Пекле рівного 1.0. На Рис. 1 продемонстровано стійкість розв'язку для різного розбиття, а саме те, що збільшення кількості скінченних елементів не сильно впливає на апроксимацію розв'язку.

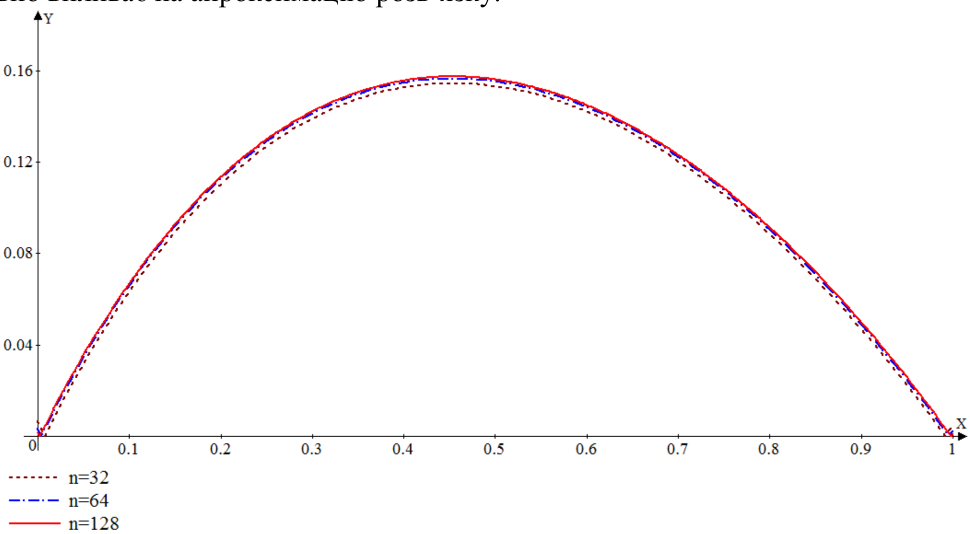

Рис. 1 Концентрація наночастинок дляPe=1.0

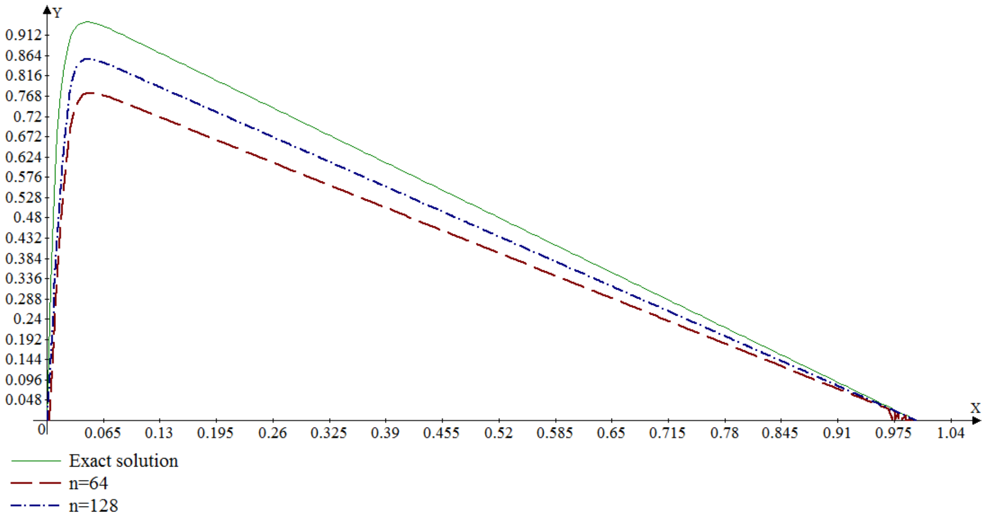

Рис. 2 Концентрація наночастинок дляPe=100.0

Другий обчислювальний експеримент проведено для Pe=100.0, а одержаний результат було порівняно із точним розв'язком, який має вигляд:

$$c(x)=\left[x-\frac{\exp(\gamma x)-1}{\exp(\gamma)-1}\right]\frac{f}{V_1}, \qquad \text{де: } \gamma=\frac{V_1}{K};\ \sigma=0.$$

На Рис. 2 видно, що збільшення кількості скінченних елементів покращує результат апроксимації.

Таким чином, одержані результати для тестової задачі (6) підтверджують, що використання запропонованого підходу в методі скінченних елементів призводить до стійкості та збіжності результату апроксимації. Надалі вищевказаний підхід буде апробовано на нестаціонарній плоскій задачі.

Висновок. Отже, було розглянуто математичну модель, що описує процес розповсюдження ліків у стінці судини. Оскільки в ході першого обчислювального експерименту було встановлено, що стандартний підхід методу скінченних елементів з лінійним та квадратичним базисом не дає коректний результат наближення розв'язку, то було вирішено застосувати новий підхід на основі застосування експоненціальної заміни в постановці задачі та зворотної заміну у самому ході методу скінченних елементів. Результати числових експериментів для різних чисел Пекле підтвердили надійність даного підходу. Наразі ведеться робота над поширенням даного підходу на нестаціонарні плоскі задачі адвекції-дифузії.

Література

[1] *Hossain S., Hossainy F., Bazilevs Y.* Mathematical modeling of coupled drug and drug-encapsulated nanoparticle transport in pacient-specific coronary artery walls. — Texas: University of Texas, 2010. — 162 p.

[2] *Савула Я. Г.* Числовий аналіз задач математичної фізики варіаційними методами — Львів: видавничий центр ЛНУ ім. Івана Франка, 2004. — 221 с.

[3] *Савула Я., Турчин Ю., Кіт Н.* Комп'ютерне моделювання процесу перенесення ліків у живих тканинах // Вісник ЛНУ ім. І. Франка. Серія прикл. матем. — 2013. — Вип. 19. — С. 93-98.

[4] *Карташов Э. М.* Аналитические методы в теории теплопроводности твердых тел. — Москва: Высшая школа, 1985. — 480 р.

[5] *Hecht F.* FreeFEM++ unlogiciel de resolution EDP en 2 et 3d. — Paris: Labolatoire Jacques-Louis Lions, 2008. — 125 p.

[6] *Шилдт Г.* Полное руководство C# 3.0. — Москва: Издательский дом “Вильямс”, 2010. — 951 с.

Exponential replacement in finite element method for advection-diffusion equations

YuliyaTurchyn

A mathematical model of drug distribution in the artery wall during catheter treatment of atherosclerosis, which is presented as initial-boundary value problem for a system of two differential equations, is formulated. During the first numerical experiment it was found that direct application of the finite element method with standard linear and quadratic basis functions leads to a loss of stability of the solution. This is due to the specifics of the input parameters of the problem, in fact a significant advantage over advection coefficients of diffusion coefficients. The drawback is overcome by using approximations based on exponential replacement in problem formulation that leads to a loss of advection term and after by using reverse replacement inside finite element method. Results of computational experiments for one-dimensional spatial variables for stationary problems are demonstrated.

Экспоненциальная замена в методе конечных элементов для уравнений адвекции-диффузии

Юлия Турчин

Рассмотрена математическая модель процесс араспространения лекарств в стенках сосудов при лечении атеросклероза,чт опредставляет собой начально-краевую задачу для системы двух дифференциальных уравнений. В ходе первого численного эксперимента обнаружено, что прямое применение метода конечных элементов состандартными линейными и квадратичными базисными функциями приводит к потере устойчивости решения. Это связано со спецификой входных параметров задачи, а,собственно, созначительным преимуществом коэффициентов адвекции над коэффициентами диффузии. Недостаток преодолен путеми спользования аппроксимаций на основе экспоненциальной замены в постановке задачи, что приводит к потере адвективного слагаемого, а затем обратной замены в методе конечных элементов и приведены результаты вычислительного эксперимента для одномерной по пространственным переменным стационарной задачи.

Отримано 19.12.16