Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

Т. Ф. Долгих, Методы решения задачи зонального электрофореза с периодическими начальными данными, *Итоги науки и техн. Сер. Современ. мат. и ее прил. Темат. обз.*, 2019, том 172, 38–47

DOI: <https://doi.org/10.36535/0233-6723-2019-172-38-47>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением

<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 35.173.219.12

26 апреля 2023 г., 14:39:56

ИТОГИ НАУКИ И ТЕХНИКИ.
Современная математика и ее приложения.
Тематические обзоры.
Том 172 (2019). С. 38–47
DOI: 10.36535/0233-6723-2019-172-38-47

УДК 517.956, 517.958:531.32, 519.63

МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ ЗОНАЛЬНОГО ЭЛЕКТРОФОРЕЗА С ПЕРИОДИЧЕСКИМИ НАЧАЛЬНЫМИ ДАННЫМИ

© 2019 г. Т. Ф. ДОЛГИХ

Аннотация. Рассмотрена задача зонального электрофореза двухкомпонентной смеси с пространственно-периодическим начальным распределением компонент смеси. Предложены два способа решения: аналитический (метод годографа) и численный (метод конечных объемов). Проведен сравнительный анализ полученных результатов.

Ключевые слова: модель зонального электрофореза, метод годографа, метод конечных объемов, пространственно-периодические начальные данные.

METHODS FOR SOLVING THE PROBLEM OF ZONAL ELECTROPHORESIS WITH PERIODIC INITIAL DATA

© 2019 T. F. DOLGIKH

ABSTRACT. We consider the problem of zonal electrophoresis of a two-component mixture with spatially periodic initial distribution of the mixture components. Two methods of solution are proposed: analytical (hodograph method) and numerical (method of finite volumes). A comparative analysis of the results obtained is performed.

Keywords and phrases: model of zone electrophoresis, hodograph method, method of finite volumes, spatially periodic initial data.

AMS Subject Classification: 35Q35, 35L03, 35J62

1. Введение. Процесс переноса и разделения смеси веществ на отдельные составляющие под действием электрического поля в достаточно длинном капилляре с непроницаемыми боковыми стенками называется зональным электрофорезом. Этот метод разделения широко применяется в медицине, биологии, химии, например, для определения и выделения составляющих многокомпонентной смеси.

В работе рассматривается начальная стадия зонального электрофореза, когда электромиграционные эффекты играют более значимую роль в изменении профиля концентраций индивидуальных компонент смеси, чем диффузионные эффекты, что позволяет исследовать бездиффузионную модель в случае сильных электролитов, когда вещества полностью диссоциировали на ионы, и нейтральные элементы кроме растворителя (воды) в смеси отсутствуют.

В зависимости от параметров компонент (например, зарядности, подвижности) проводимость всей смеси при изменении количества ионов может как увеличиваться, так и уменьшаться. Объясняется такой эффект электронейтральностью раствора. Если в некоторую область раствора поместить ионы с большой подвижностью, то в силу электронейтральности всей смеси они будут вытеснены менее подвижными ионами, и в данной области общая проводимость раствора

Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации (базовая часть технического задания № 1.5169.2017/8.9).

понижутся. Напротив, если добавить в раствор компонент с малым значением подвижности, то он вытеснит более подвижные соседние ионы (см. [5]). При построении математической модели указанные эффекты приводят к тому, что система квазилинейных дифференциальных уравнений первого порядка, описывающая процесс, может иметь как гиперболический тип, так и эллиптический, в зависимости от изменения концентраций отдельных компонент смеси.

В данной работе представлены исследования процесса переноса веществ в двухкомпонентной смеси (см. также [1–3, 7]). Рассматриваются случаи гиперболических и эллиптических уравнений. Для анализа изменений с течением времени концентраций компонент смеси использовались пространственно-периодические начальные распределения. Решение задачи проводилось с помощью метода годографа и метода конечных объемов.

2. Постановка задачи. Процесс зонального электрофореза для двухкомпонентной смеси описывается системой двух квазилинейных уравнений следующего вида (см. [2, 5]):

$$U_t + A(U)U_x = 0, \quad (1)$$

где

$$U = \begin{pmatrix} u^1 \\ u^2 \end{pmatrix}, \quad H = \begin{pmatrix} \frac{\mu^1 u^1}{1+s} \\ \frac{\mu^2 u^2}{1+s} \end{pmatrix}, \quad A_k^j(U) = \frac{\partial H^j(U)}{\partial u^k}, \quad j, k = 1, 2.$$

Здесь $\mu^k \equiv \text{const}$ и $u^k = u^k(x, t)$ ($-\infty < x < \infty$, $t > 0$) — подвижности и «эффективные» концентрации отдельных компонент смеси, а $(1+s) = 1 + u^1 + u^2$ — полная проводимость всей смеси в целом. Эффективные концентрации u^k определяются через концентрации компонент смеси и их зарядности. Поэтому они могут принимать как положительные, так и отрицательные значения. Однако проводимость всей смеси $(1+s)$ величина всегда положительная. В начальный момент процесса разделения смеси известны концентрации каждой компоненты

$$u^k(x, 0) = \tilde{u}^k(x), \quad k = 1, 2. \quad (2)$$

Решение задачи (1)–(2) во многом зависит от типа уравнений системы (1), который может быть как гиперболическим, так и эллиптическим (см. [2, 3, 7]). Как правило, дифференциальные уравнения в частных производных первого порядка вида (1) имеют гиперболический тип. Однако в тех случаях, когда концентрация компонент смеси велика и проводимость всей смеси в целом может уменьшаться при увеличении концентраций, тип квазилинейных уравнений изменяется на эллиптический.

Введем обозначение

$$B = \mu^1 + \mu^2 + \mu^2 u^1 + \mu^1 u^2. \quad (3)$$

Тип уравнений (1) определяется значением величины

$$D = B^2 - 4\mu^1 \mu^2 (1+s). \quad (4)$$

Из соотношения (4) видно, что на (u^1, u^2) -плоскости линия $D = 0$ является параболой (см. рис. 1). Известно, что в области $D > 0$, $1+s > 0$ тип уравнений гиперболический, в области $D < 0$ — эллиптический (см. [7]).

3. Методы решения. Рассмотрим два способа решения задачи (1)–(2). Первый из них — это метод годографа, основанный на законах сохранения (см. [11]). Известно, что система n квазилинейных гиперболических уравнений интегрируема, если выполняется условие полугамильтоновости

$$\partial_i \left(\frac{\partial_j \lambda^k}{\lambda^j - \lambda^k} \right) = \partial_j \left(\frac{\partial_i \lambda^k}{\lambda^i - \lambda^k} \right), \quad i \neq j \neq k, \quad \partial_i = \frac{\partial}{\partial R^i},$$

где $R^k = R^k(x, t)$ — инварианты Римана, $\lambda^k = \lambda^k(R)$ — собственные значения матрицы системы $A_j^i(u)$, $i, j, k = 1, 2, \dots, n$.

Рис. 1. Области гиперболичности и эллиптичности уравнения (1)

Так как система из двух уравнений гиперболического типа всегда приводится к инвариантам Римана R^1, R^2

$$\frac{\partial R^k}{\partial t} + \lambda^k(R) \frac{\partial R^k}{\partial x} = 0, \quad \lambda^k = R^k R^1 R^2, \quad k = 1, 2, \quad (5)$$

и условие полутамильтоновости будет выполняться автоматически, то система (1) разрешима, причем она может быть преобразована в однородную систему двух линейных гиперболических уравнений с коэффициентами, зависящими от (u^1, u^2) , относительно функций $t(u^1, u^2)$, $x(u^1, u^2)$ (см. [8]). Такой обмен ролями зависимых и независимых переменных и есть обычный метод годографа.

С математической точки зрения для формального применения обычного метода годографа гиперболичность системы квазилинейных уравнений не является строго необходимым условием. Система (1) интегрируема и в случае комплексных собственных значений матрицы $\mathbf{A}$, т.е. метод годографа применим и для решения эллиптических квазилинейных уравнений.

Второй метод — метод конечных объемов (МКО). Это численный метод интегрирования систем дифференциальных уравнений в частных производных гиперболического типа, основанный на законах сохранения в каждом конечном (контрольном) объеме рассматриваемого пространства.

4. Метод годографа. Инварианты Римана в системе (5) вычисляются по формулам (см. [5])

$$R^1 = \frac{B - \sqrt{D}}{2(1+s)}, \quad R^2 = \frac{B + \sqrt{D}}{2(1+s)}, \quad (6)$$

где B, D определены соотношениями (3) и (4) соответственно.

Отметим, что эллиптичность уравнений (1) соответствует комплексно сопряженным собственным значениям λ^i и инвариантам Римана R^i .

Связь между переменными уравнений (1) и (5) дается соотношениями

$$u^1 = \frac{\mu^2(R^1 - \mu^1)(R^2 - \mu^1)}{R^1 R^2(\mu^1 - \mu^2)}, \quad u^2 = \frac{\mu^1(R^1 - \mu^2)(R^2 - \mu^2)}{R^1 R^2(\mu^1 - \mu^2)}. \quad (7)$$

Удобно далее использовать замену переменных $R^i = 1/K^i$, $i = 1, 2$. Тогда в новых переменных, которые также являются инвариантами Римана, уравнения (5) примут вид

$$K_t^1 + \Lambda^1 K_x^1 = 0, \quad K_t^2 + \Lambda^2 K_x^2 = 0, \quad (8)$$

где

$$\Lambda^1 = \frac{1}{K^1 K^1 K^2}, \quad \Lambda^2 = \frac{1}{K^2 K^1 K^2}.$$

Для уравнений (8) на некотором контуре

$$\Gamma = \{(x, t) : x = x(\tau), t = t(\tau), a \leq \tau \leq b\}, \quad (9)$$

не являющемся характеристикой, определены начальные данные

$$K^1|_{\Gamma} = K_0^1(\tau), \quad K^2|_{\Gamma} = K_0^2(\tau). \quad (10)$$

Здесь $K_0^i(\tau)$ ($i = 1, 2$) — функции, определяемые начальными распределениями (2).

В [11] описан метод годографа, в котором замена $(K^1, K^2) \leftrightarrow (x, t)$ позволяет получить неявные решения $t = t(K^1, K^2)$ и $x = x(K^1, K^2)$ уравнений (8), позволяющие восстановить явный вид неизвестных функций $u^1(x, t)$, $u^2(x, t)$ при помощи соотношений (7). Следуя алгоритму, описанному в [11], предположим, что для (8) имеется закон сохранения

$$\varphi_t + \psi_x = 0,$$

где $\varphi(K^1, K^2)$ — плотность, $\psi(K^1, K^2)$ — плотность потока, для которых выполнены уравнения

$$\psi_{K^1} = \Lambda^1 \varphi_{K^1}, \quad \psi_{K^2} = \Lambda^2 \varphi_{K^2}. \quad (11)$$

Условия разрешимости приводят к линейным дифференциальным уравнениям второго порядка с переменными коэффициентами:

$$\varphi_{K^1 K^2} - \frac{1}{K^2 - K^1} \varphi_{K^1} + \frac{1}{K^2 - K^1} \varphi_{K^2} = 0, \quad (12)$$

$$\psi_{K^1 K^2} + \frac{K^1}{K^2(K^1 - K^2)} \psi_{K^1} - \frac{K^2}{K^1(K^1 - K^2)} \psi_{K^2} = 0. \quad (13)$$

Для определения функций $\varphi(K^1, K^2)$, $\psi(K^1, K^2)$ эти уравнения дополняются условиями

$$(\psi - \Lambda^1 \varphi)|_{K^1=k^1} = 1, \quad (\psi - \Lambda^2 \varphi)|_{K^2=k^2} = -1; \quad (14)$$

$$(\psi - \Lambda^1 \varphi)|_{K^1=k^1} = \Lambda^1|_{K^1=k^1}, \quad (\psi - \Lambda^2 \varphi)|_{K^2=k^2} = -\Lambda^2|_{K^2=k^2}. \quad (15)$$

Решением $\varphi(K^1, K^2)$ задачи (12), (14) с точностью до множителей является функция Римана—Грина $\Phi(K^1, K^2 | k^1, k^2)$:

$$\varphi^t(K^1, K^2) = \frac{2}{\Lambda^2(k^1, k^2) - \Lambda^1(k^1, k^2)} \Phi(K^1, K^2 | k^1, k^2).$$

Тогда, согласно условиям (11), получаем

$$\psi^t(k^1, k^2) = \frac{\Lambda^1(k^1, k^2) + \Lambda^2(k^1, k^2)}{2} \varphi^t(k^1, k^2),$$

где $K^1 = k^1$, $K^2 = k^2$.

Для исследуемых уравнений функция Римана—Грина имеет вид (см. [9])

$$\Phi(K^1, K^2 | k^1, k^2) = \frac{(K^1 + K^2)(k^1 + k^2) - 2K^1 K^2 - 2k^1 k^2}{(k^1 - k^2)^2}.$$

Плотность потока $\psi(K^1, K^2)$ определяется из задачи (13), (15)

$$\psi^x(K^1, K^2) = \frac{2\Lambda^1(k^1, k^2)\Lambda^2(k^1, k^2)}{\Lambda^2(k^1, k^2) - \Lambda^1(k^1, k^2)} \Phi(K^1, K^2 | k^1, k^2).$$

Для определения функции φ^x интегрируется одно из уравнений в (11):

$$\varphi^x(k^1, K^2) = \frac{\psi^x(k^1, K^2)}{\Lambda^1(k^1, K^2)} - 1 \quad \text{или} \quad \varphi^x(K^1, k^2) = \frac{\psi^x(K^1, k^2)}{\Lambda^2(K^1, k^2)} + 1.$$

Рассмотрим случай, когда контур Γ , определенный (9), является отрезком оси $t = t_0$. Тогда начальные условия (10) запишутся в виде

$$K^1|_{t=t_0} = K_0^1(\tau), \quad K^2|_{t=t_0} = K_0^2(\tau), \quad a \leq \tau \leq b. \quad (16)$$

Отсюда следует, что

$$k^1 = K_0^1(b), \quad k^2 = K_0^2(a). \quad (17)$$

Неявное решение задачи Коши (8), (10) имеет вид

$$t = t_0 + \frac{1}{2} \int_a^b \varphi^t d\tau, \quad x = \frac{a+b}{2} + \frac{1}{2} \int_a^b \varphi^x d\tau. \quad (18)$$

Таким образом, выбор естественного начального условия при $t = t_0$, а не на произвольном контуре Γ , упрощает формулы, в частности, отпадает необходимость в определении функции ψ^t .

Рассмотрим решение задачи Коши (8), (10) в случае гиперболичности уравнений (8). Тогда собственные значения λ^k и инварианты Римана R^k будут вещественными, а линии уровня $t(a, b)$, $x(a, b)$, рассчитанные по формулам (18), описываются соотношениями

$$t(a, b) = t_0 + \frac{(k^1 k^2)^2 (-2k^1 k^2 (b-a) + (k^1 + k^2)F - 2G)}{(k^1 - k^2)^3},$$

$$x(a, b) = \frac{a+b}{2} + \frac{((k^1)^2 - 4k^1 k^2 + (k^2)^2)(k^1 + k^2)(b-a)}{2(k^1 - k^2)^3} + \frac{2k^1 k^2 F - (k^1 + k^2)G}{(k^1 - k^2)^3},$$

где $k^1 = K_0^1(b)$, $k^2 = K_0^2(a)$,

$$F = \int_a^b (K_0^1(\tau) + K_0^2(\tau)) d\tau, \quad G = \int_a^b K_0^1(\tau) K_0^2(\tau) d\tau.$$

Для восстановления явного решения выбираем произвольную точку (a_*, b_*) и для некоторого параметра ρ на изолинии $t_* = t(a_*, b_*)$ решаем задачу Коши для обыкновенных дифференциальных уравнений (см. [7, гл. 3])

$$\frac{da}{d\rho} = -t_b(a, b), \quad \frac{db}{d\rho} = t_a(a, b)a \Big|_{\rho=0} = a_*, \quad b \Big|_{\rho=0} = b_*. \quad (19)$$

В случае, когда инварианты Римана K^1 , K^2 комплексно сопряжены, ключевым моментом в построении решения поставленной задачи (8), (10) будет требование комплексной сопряженности параметров a и b в (9).

Введем следующие обозначения:

$$\begin{aligned} \mathbf{a} &= u + iv, \quad \mathbf{b} = u - iv, \quad \mathbf{a}^* = \mathbf{b}, \\ \mathbf{K} &= K^1 = P + iQ, \quad \mathbf{K}^* = K^2 = P - iQ, \\ \mathbf{k} &= k^1 = p + iq, \quad \mathbf{k}^* = k^2 = p - iq, \end{aligned} \quad (20)$$

где $P = P(u, v)$, $Q = Q(u, v)$, $p = p(u, v)$, $q = q(u, v)$ — вещественные функции от вещественных переменных u, v .

Таким образом, задачу (8), (10) можно переписать в комплексной форме:

$$\mathbf{K}|\mathbf{K}|^2 \mathbf{K}_t + \mathbf{K}_x = 0, \quad \mathbf{K}|_{t=t_0} = \mathbf{K}_0(\tau). \quad (21)$$

Здесь $\mathbf{K}_0(\tau) = P_0(\tau) + iQ_0(\tau)$ — известная функция.

Соотношения (18) с учетом введенных замен и равенств (17) и (20) запишутся следующим образом:

$$t(u, v) = t_0 + \frac{(p^2 + q^2)^2 (4iv(p^2 + q^2) + 2pF - 2G)}{(2iq)^3},$$

$$x(u, v) = u + \frac{2(p^2 + q^2)F - 2pG - 2ipv(4p^2 - 6(p^2 + q^2))}{(2iq)^3},$$

где

$$F(u, v) = 2 \int_{u+iv}^{u-iv} P_0(\tau) d\tau, \quad G(u, v) = \int_{u+iv}^{u-iv} (P_0^2(\tau) + Q_0^2(\tau)) d\tau.$$

Легко показать, что функции $F(u, v)$ и $G(u, v)$ чисто мнимые. Положим

$$F^0(u, v) = \operatorname{Im} F(u, v), \quad G^0(u, v) = \operatorname{Im} G(u, v).$$

Очевидно, что функции F^0 , G^0 — вещественные функции, зависящие от вещественных переменных u , v .

Используя (20), из начального условия получим соотношения для функций p и q :

$$p(u, v) = \operatorname{Re} \mathbf{K}_0(b), \quad q(u, v) = \operatorname{Im} \mathbf{K}_0(b).$$

Таким образом, получаем неявное решение задачи Коши (21):

$$t(u, v) = t_0 - \frac{(p^2 + q^2)^2 (pF_0 - G_0 + 2v(p^2 + q^2))}{4q^3}, \quad (22)$$

$$x(u, v) = u - \frac{pG^0 - (p^2 + q^2)F_0 - 2p(p^2 + 3q^2)}{4q^3}, \quad (23)$$

которое полностью определено начальными условиями.

Для восстановления явного решения задачи Коши на некоторых линиях уровня неявного решения, отвечающих фиксированным значениям $t_* = \operatorname{const}$, решаем задачу Коши

$$\begin{aligned} \frac{du}{d\rho} &= -t_v(u, v)q^4(u, v), & \frac{dv}{d\rho} &= t_u(u, v)q^4(u, v), \\ u|_{\rho=0} &= u_*, & v|_{\rho=0} &= v_* \end{aligned} \quad (24)$$

(см. [7, гл. 7]), где ρ — некоторый параметр, а значения величин u_* , v_* идентифицируют изохрону $t_* = t(u_*, v_*)$.

Производные t_u , t_v вычисляются с помощью (22), а пространственная координата на изохроне $x = x(u(\rho), v(\rho))$ — с помощью (23).

Правая часть дифференциальных уравнений (24) определена с точностью до произвольного множителя. Используемый здесь множитель $q^4(u, v)$ позволяет избавиться от особенности правых частей в точке $q = 0$.

Определив значения $u(\rho)$, $v(\rho)$ на изохроне $t = t_*(u_*, v_*)$, найдем функции $p(u, v)$, $q(u, v)$. Далее вычислим концентрации компонент смеси, которые связаны с инвариантами Римана при помощи соотношений (7):

$$u^1 = \frac{\mu^2(1 - 2\mu^1 p + \mu^1 \mu^1 (p^2 + q^2))}{\mu^1 - \mu^2}, \quad u^2 = \frac{\mu^1(1 - 2\mu^2 p + \mu^2 \mu^2 (p^2 + q^2))}{\mu^2 - \mu^1}.$$

5. Метод конечных объемов. Пусть $D > 0$, $1 + s > 0$. Найдем решение поставленной задачи с помощью метода конечных объемов (МКО; см. [6]).

В исходной постановке задача Коши (1)–(2) определена на бесконечной оси $-\infty < x < \infty$. Однако для численной реализации удобно выбрать такой конечный интервал $[a, b]$, на котором происходят основные изменения концентраций. Выбранный промежуток разбивается на ячейки

$$\Omega_i = [x_{i-1/2}, x_{i+1/2}],$$

которые имеют центры x_i . Используем обычную сетку с постоянным шагом $h = (b - a)/n$, т.е. $x_i = ih$, $i = 0, 1, \dots, n$.

После интегрирования уравнения (1) по области каждой ячейки Ω_i имеем

$$h \frac{d\mathbf{U}_i}{dt} = \mathbf{H}_{i+1/2} - \mathbf{H}_{i-1/2},$$

где $\mathbf{U}_i = (u^1(x_i, t), u^2(x_i, t))^T$.

Рис. 2. Концентрации компонент смеси $u_1(x, t)$, $u_2(x, t)$, вычисленные с помощью метода годографа для начальных условий (27), в моменты времени $t = 1,45, 2,61, 4,52, 6,26$ при $a_* = -0,29, -1,13, -2,35, -3,67, b_* = 0,40$ соответственно.

Если применить временную аппроксимацию, как в явном методе Эйлера, то получим вместо уравнений в частных производных (1) систему обыкновенных дифференциальных уравнений с начальными условиями (2):

$$\frac{U_i^{m+1} - U_i^m}{\tau} = \frac{H_{i+1/2}^m - H_{i-1/2}^m}{h}. \quad (25)$$

Здесь верхний индекс m означает величины U_i и H_i в момент времени t_m . Отметим, что $t_{m+1} = t_m + \tau$, где τ — шаг по времени.

Для аппроксимации значений вектора H на границах отрезка Ω_i используем HLL-аппроксимацию (см. [10]).

Вычислим собственные значения матрицы $A(U)$:

$$\lambda_{1,2}(U) = \frac{B \mp \sqrt{D}}{2(1+s)^2},$$

Рис. 3. Концентрации компонент смеси $u_1(x, t)$, $u_2(x, t)$, вычисленные с помощью МКО для начальных условий (27), в моменты времени $t = 1,45, 2,61, 4,52, 6,26$.

где B и D определяются соотношениями (3) и (4) соответственно. Далее для границ ячейки Ω_i определим численные потоки

$$\mathcal{H}(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = \begin{cases} \mathbf{H}(\mathbf{a}), & \lambda_L > 0, \\ \mathbf{H}(\mathbf{b}), & \lambda_R < 0, \\ \frac{\lambda_R \mathbf{H}(\mathbf{a}) - \lambda_L \mathbf{H}(\mathbf{b}) + \lambda_L \lambda_R (\mathbf{b} - \mathbf{a})}{\lambda_R - \lambda_L}, & \lambda_L \leq 0 \leq \lambda_R, \end{cases}$$

$$\lambda_L = \min \{ \lambda_1(\mathbf{a}), \lambda_1(\mathbf{b}), \lambda_2(\mathbf{a}), \lambda_2(\mathbf{b}) \}, \quad \lambda_R = \max \{ \lambda_1(\mathbf{a}), \lambda_1(\mathbf{b}), \lambda_2(\mathbf{a}), \lambda_2(\mathbf{b}) \}.$$

Таким образом, разностная схема (25) окончательно примет вид

$$\mathbf{U}_i^{m+1} = \frac{\tau}{h} [\mathcal{H}(\mathbf{U}_{i-1}^m, \mathbf{U}_i^m) - \mathcal{H}(\mathbf{U}_i^m, \mathbf{U}_{i+1}^m)] + \mathbf{U}_i^m, \quad m = 1, 2, \dots, \quad (26)$$

где $\mathbf{U}_i^m = (u^1(x_i, t_m), u^2(x_i, t_m))^T$, $\mathbf{U}_i^0 = (\tilde{u}^1(x_i), \tilde{u}^2(x_i))^T$, $i = 0, 1, \dots, n$.

6. Примеры решений задач Коши. В случае квазилинейных уравнений в частных производных первого порядка независимые переменные t и x в некотором смысле равноправны. Поэтому о задаче с данными на какой-либо линии (9) принято говорить как о задаче Коши (см. [8]). Для эллиптических уравнений вовсе не принято говорить о начальных данных, однако далее используем термин задача Коши, так как концентрации заданы на отрезке оси $t = t_0$.

Рис. 4. Концентрации компонент смеси $u_1(x, t)$, $u_2(x, t)$, вычисленные с помощью метода годографа для начальных условий (28), в моменты времени $t = 0,1209, 0,5943, 0,6348, 0,7597$.

Рассмотрим случай гиперболичности уравнений (1). Пусть начальные распределения компонент смеси (2) заданы периодическим по пространству условием

$$\tilde{u}^1(x) = \alpha^1 + \beta^1 \cos \omega^1 x, \quad \tilde{u}^2(x) = \alpha^2 + \beta^2 \sin \omega^2 x, \quad (27)$$

где $\alpha^k, \beta^k, \gamma^k, \omega^k$ ($k = 1, 2$) — некоторые константы. Положим

$$\mu^1 = 1, \quad \mu^2 = 3, \quad \alpha^1 = 1, \quad \alpha^2 = 4, \quad \beta^1 = 0,3, \quad \beta^2 = 0,9, \quad \omega^1 = 1, \quad \omega^2 = 2.$$

Для этих параметров решим задачу Коши (1)–(2) с начальными распределениями (27) методом годографа и методом конечных объемов. Графики изменения концентраций $u_1(x, t)$ и $u_2(x, t)$ в одинаковые моменты времени показаны на рис. 2 и 3.

Известно, что сплошные среды, которые описываются уравнениями эллиптического типа, ведут себя как неустойчивые квазигазовые среды типа газа Чаплыгина. Для исследования таких сред часто используются пространственно-периодические начальные данные. Рассмотрим такие же начальные распределения концентраций и для анализа эволюции решений задачи зонального электрофореза (21) (см. также [2, 3, 7]). Пусть $K_0^1(\tau) = P_0 + iQ_0$, $K_0^2(\tau) = P_0 - iQ_0$, где

$$P_0(\tau) = -\varepsilon \sin \tau \cos \tau, \quad Q_0(\tau) = 1 + \varepsilon \sin \tau. \quad (28)$$

Здесь ε — амплитуда возмущения состояния равновесия $P_0 = 0$, $Q_0 = 1$, которое может возникнуть, например, из-за неустойчивости внешнего электрического поля.

На рис. 4 представлены результаты расчетов при $\mu^1 = 1$, $\mu^2 = 3$, $\varepsilon = 0,1$.

7. Заключение. Решение задачи электрофореза для двухкомпонентной смеси методом годографа на основе закона сохранения можно использовать для любых, в том числе и не гладких, начальных данных. Фактически этот метод позволяет сводить решение задачи Коши для двух квазилинейных уравнений в частных производных первого порядка к решению некоторой задачи Коши для обыкновенных дифференциальных уравнений. Более того, метод позволяет получить точное решение, хотя и в неявном виде, в аналитической форме, в частности, построить уравнения для линий уровня решения. Решение задачи Коши для обыкновенных дифференциальных уравнений требуется лишь для преобразования неявного решения в явное. В этом смысле метод является полуаналитическим, и его точность зависит лишь от точности интегрирования системы обыкновенных дифференциальных уравнений. Иными словами, не требуется никаких аппроксимаций уравнений в частных производных для построения вычислительных схем. Конечно, метод построения аналитического решения применим лишь тогда, когда для линейного уравнения в частных производных второго порядка (в статье это уравнение (12)) удастся указать функцию Римана—Грина. Однако набор уравнений, имеющих известные функции Римана—Грина, достаточно широк (см., например, [4, 7, 9, 11]).

Приведенные численные решения методом конечных объемов показывают, что в случае гиперболических уравнений результаты расчетов мало отличаются от решений, полученных методом годографа, хотя на больших временах совпадение результатов будет не таким хорошим. Для уравнений эллиптического типа метод конечных объемов в стандартном виде не пригоден. В частности, следует существенно изменять схему построения численных потоков, и возможность использования HLL-аппроксимации нуждается в детальном исследовании. Напротив, метод годографа и в случае уравнений эллиптического типа позволяет эффективно строить решения.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Долгих Т. Ф. Метод конечных объемов для решения задачи зонального электрофореза// XIX Международный конф. «Современные проблемы механики сплошной среды» (Ростов-на-Дону, 15–18 октября 2018), 2018. — С. 94–98.
2. Долгих Т. Ф. Решение задачи о переносе массы под действием электрического поля в двухкомпонентной смеси// Изв. Сев-Кавказ. науч. центра высш. школы. Естеств. науки. — 2017. — № 3-1 (195-1). — С. 28–35.
3. Долгих Т. Ф., Жуков М. Ю., Ширяева Е. В. Решение эллиптических уравнений с периодическими данными для задачи зонального электрофореза// Вестн. Воронеж. гос. ун-та. Сер. Физ. Мат. — 2017. — № 2. — С. 85–96.
4. Жданов С. К., Трубников Б. А. Квазигазовые неустойчивые среды. — М.: Наука, 1971.
5. Жуков М. Ю. Массоперенос электрическим полем. — Ростов-на-Дону: РГУ, 2005.
6. Жуков М. Ю., Ширяева Е. В. Математическое моделирование процесса седиментации примеси в потоке жидкости. — Ростов-на-Дону: ЮФУ, 2016.
7. Жуков М. Ю., Ширяева Е. В., Долгих Т. Ф. Метод годографа для решения гиперболических и эллиптических квазилинейных уравнений. — Ростов-на-Дону: ЮФУ, 2015.
8. Рождественский Б. Л., Яценко Н. Н. Системы квазилинейных уравнений. — М.: Наука, 1978.
9. Copson E. T. On the Riemann–Green Function// Arch. Rat. Mech. Anal. — 1958. — 1. — P. 324–348.
10. Harten A. High resolution schemes for hyperbolic conservation laws// J. Comput. Phys. — 1997. — 135. — P. 260–278.
11. Senashov S. I., Yakhno A. Conservation laws, hodograph transformation and boundary value problems of plane plasticity// SIGMA. — 2012. — 8. — 071.

Долгих Татьяна Федоровна

Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону

E-mail: dolgikh@sfedu.ru