На правах рукописи

Гаврилова Ольга Витальевна

ЧИСЛЕННО-АНАЛИТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ И АЛГОРИТМЫ ИССЛЕДОВАНИЯ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ АВТОКАТАЛИТИЧЕСКОЙ РЕАКЦИИ С ДИФФУЗИЕЙ И РАСПРОСТРАНЕНИЯ НЕРВНОГО ИМПУЛЬСА В МЕМБРАННОЙ ОБОЛОЧКЕ

05.13.18 – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ
05.13.01 – Системный анализ, управление и обработка информации (информатика, информационно-вычислительное обеспечение)

АВТОРЕФЕРАТ
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

ЧЕЛЯБИНСК – 2021

Работа выполнена в ФГАОУ ВО «Южно-Уральский государственный университет (национальный исследовательский университет)»

Научный руководитель:

доктор физико-математических наук, доцент
Манакова Наталья Александровна

Официальные оппоненты:

доктор физико-математических наук, профессор
Чистяков Виктор Филимонович
ФГБУН «Институт динамики систем и теории управления им. В.М. Матросова» СО РАН, лаборатория системного анализа и вычислительных методов,
главный научный сотрудник;

доктор физико-математических наук, профессор
Сукачева Тамара Геннадьевна
ФГБОУ ВО «Новгородский государственный университет имени Ярослава Мудрого»,
кафедра алгебры и геометрии, заведующий кафедрой

Ведущая организация:

ФГБОУ ВО «Магнитогорский государственный технический университет им. Г.И. Носова»

Защита состоится 29 июня 2021 года в 14 ч. 00 м. на заседании диссертационного совета Д 212.298.14, созданного на базе Южно-Уральского государственного университета, по адресу: 454080, г. Челябинск, пр. Ленина, 76, ауд. 1001.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Южно-Уральского государственного университета и на сайте:
https://www.susu.ru/ru/dissertation/d-21229814/gavrilova-olga-vitalevna

Автореферат разослан «____» __________ 2021 г.

Ученый секретарь диссертационного совета
доктор физ.-мат. наук, доцент Н.А. Манакова

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность и степень разработанности темы исследования. Диссертационная работа посвящена разработке аналитических, численных методов и алгоритмов исследования вырожденных математических моделей автокаталитической реакции с диффузией и распространения нервного импульса в мембранной оболочке. Актуальность изучения такого рода моделей обусловлена необходимостью решения важных прикладных задач в области кинетической химии и биофизики. При исследовании процессов в этих областях знаний применяются различные методы математического моделирования. Наиболее широкое распространение получило исследование полулинейных уравнений типа реакции-диффузии. Их характерной особенностью является наличие малого параметра при старшей производной по времени, стремящегося к нулю, что влечет наличие «расслоения» (т.е. неединственности) решений при одинаковых начальных условиях, данные экспериментов это подтверждают. Первым подходом к исследованию этой особенности является теория сингулярных возмущений. Исследованию математических моделей типа реакции-диффузии и феномена неединственности решений в рамках этого подхода посвящены работы П.А. Доменико, Ф.В. Шварца, Е.Е. Холмса, А.Н. Тихонова, В.А. Треногина, А. Тьюринга и других. Вторым подходом является исследование вырожденных уравнений типа реакции-диффузии, когда параметр при производной по времени медленно действующей компоненты берется равным нулю[1]. Представим вырожденные математические модели типа реакции-диффузии, исследуемые в работе.

Математическая модель автокаталитической реакции с диффузией в кювете. Одним из толчков, вызвавших бурный рост исследований по математическому моделированию в химической кинетике и биофизике, явилось открытие Б.Н. Белоусовым периодических химических реакций. А.М. Жаботинский с последователями подробно исследовал свойства этих реакций и условия их протекания, им также была предложена первая математическая модель периодической химической реакции[2], более известная как брюсселятор. В цилиндре $\Omega\times\mathbb{R}_+$ (здесь и далее под $\Omega\subset\mathbb{R}^n$ будем понимать ограниченную область с границей $\partial\Omega$ класса C^∞) рассмотрим вырожденную систему уравнений

$$\begin{cases} \varepsilon_1 v_t = \alpha_1\Delta v + \beta_1 - (\beta_2+1)v + v^2 w, \\ \varepsilon_2 w_t = \alpha_2\Delta w + \beta_2 v - v^2 w, \end{cases} \tag{1}$$

$$\varepsilon_1 = 0 \text{ или (и) } \varepsilon_2 = 0 \tag{$*$}$$

с краевым условием

---

[1] Бокарева, Т.А. Сборки Уитни фазовых пространств некоторых полулинейных уравнений типа Соболева / Т.А. Бокарева, Г.А. Свиридюк // Математические заметки. – 1994. – Т. 5, № 3. – С. 3–10.

[2] Rovinsky, A.B. Mechanism and Mathematical Model of the Oscillating Bromateferroin-Bromomalonic Acid Reaction / A.B. Rovinsky, A.M. Zhabotinsky // Journal of Physical Chemisty. – 1984. – № 88 (25). – P. 6081–6084.

$$v(s,t)=0,\ w(s,t)=0,\ (s,t)\in\partial\Omega\times\mathbb{R}_+, \tag{2}$$

и начальным условием Шоуолтера – Сидорова

$$w(s,0)=w_0(s) \text{ для случая } \varepsilon_1=0 \text{ или } v(s,0)=v_0(s) \text{ для случая } \varepsilon_2=0. \tag{3}$$

Здесь функции $v=v(s,t)$ и $w=w(s,t)$ описывают концентрации реагентов, слагаемые $\alpha_1\Delta v$, $\alpha_2\Delta w$ характеризуют диффузию реагентов, $\alpha_1,\alpha_2\in\mathbb{R}\backslash\{0\}$ – коэффициенты диффузии, параметры $\beta_1,\beta_2\in\mathbb{R}$ задают концентрации исходных реагентов, которые предполагаются постоянными. В диссертационной работе также исследована **вырожденная математическая модель автокаталитической реакции с диффузией в трубчатом реакторе**, математической интерпретацией которого является конечный связный ориентированный граф $\mathbf{G}$.

Математическая модель распространения нервного импульса в мембранной оболочке нерва. Одной из классических моделей биофизики, которая используется при описании распространения волн возбуждения, лежащих в основе передачи нервных импульсов в биологической системе, является математическая модель, построенная Р. Фитц Хью[3] и Дж. Нагумо[4]. В цилиндре $\Omega\times\mathbb{R}_+$ рассмотрим вырожденную систему уравнений

$$\begin{cases} \varepsilon_1 v_t=\alpha_1\Delta v-\beta_{11}v+\beta_{12}w,\\ \varepsilon_2 w_t=\alpha_2\Delta w-\beta_{21}v+\beta_{22}w-w^3 \end{cases} \tag{4}$$

при условии (∗), с условием Дирихле (2) и начальным условием Шоуолтера – Сидорова (3). Здесь $w=w(s,t)$ – функция, описывающая динамику мембранного потенциала, $v=v(s,t)$ – медленная восстанавливающая функция, связанная с ионными токами, $\alpha_1,\alpha_2\in\mathbb{R}\backslash\{0\}$, $\beta_{11},\beta_{12},\beta_{21},\beta_{22}\in\mathbb{R}$ – фиксированные параметры, характеризующие порог возбуждения и его скорость, электропроводность и реполяризацию среды. В диссертационной работе также исследована **вырожденная математическая модель распространения нервного импульса в мембранной оболочке системы нервов**, математической интерпретацией которой является конечный связный ориентированный граф $\mathbf{G}$.

Математическая модель оптимального регулирования процесса распространения нервного импульса в мембранной оболочке нерва. Вопрос управления биологическими и химическими процессами рассматривался еще в 70-х годах прошлого века М.Б. Бэком. В настоящее время исследованию управления процессами, описываемыми многокомпонентными невырожденными математическими моделями типа реакции-диффузии, посвящены работы А.И. Лобанова, В.И. Некоркина, его учеников и других исследователей. Для математической модели

[3]Fitzhugh, R. Impulses and Physiological States in Theoretical Models of Nerve Membrane / R. Fitzhugh // Biophysical Journal. – 1961. – V. 1, № 6. – P. 445–466.

[4]Nagumo, J. An Active Pulse Transmission Line Simulating Nerve Axon / J. Nagumo, S. Arimoto, S. Yoshizawa // Proceedings of the IRE. – 1962. – № 50 (10). – P. 2061–2071.

$$
\begin{cases}
v_{1t} - \alpha_1 \Delta v_1 + \beta_{11} v_1 + \beta_{12} v_2 + ... + \beta_{1m} v_m + \varkappa_1 v_1^3 = u_1, \\
\cdots \\
v_{kt} - \alpha_k \Delta v_k + \beta_{k1} v_1 + \beta_{k2} v_2 + ... + \beta_{km} v_m + \varkappa_k v_k^3 = u_k, \\
-\alpha_{k+1} \Delta v_{(k+1)} + \beta_{(k+1)1} v_1 + \beta_{(k+1)2} v_2 + ... + \beta_{(k+1)m} v_m = u_{(k+1)}, \\
\cdots \\
-\alpha_m \Delta v_m + \beta_{m1} v_1 + \beta_{m2} v_2 + ... + \beta_{mm} v_m = u_m,
\end{cases} \tag{5}
$$

$$
v_i(s,t) = 0,\ i = \overline{1,m},\ (s,t) \in \partial\Omega \times \mathbb{R}_+, \tag{6}
$$

$$
v_i(s,0) = v_{i0}(s),\ \ i = \overline{1,k},\ \ s \in \Omega, \tag{7}
$$

рассмотрим задачу оптимального управления

$$
J(x,u) \to \inf, \quad u \in \mathfrak{U}_{ad}. \tag{8}
$$

Здесь $J(x,u)$ – некоторый специальным образом построенный целевой функционал, $x = (v_1, v_2, \ldots, v_m)$; управление $u \in \mathfrak{U}_{ad}$, где $\mathfrak{U}_{ad}$ – некоторое непустое, замкнутое и выпуклое множество в пространстве управлений $\mathfrak{U}$. Решение задачи (5) – (8) позволяет найти такое управление процессом, при котором с наименьшими затратами будут достигнуты требуемые значения ионных токов и мембранного потенциала в оболочке. В диссертационной работе также исследована **вырожденная многокомпонентная математическая модель распространения нервного импульса в мембранной оболочке системы нервов**.

Все вышеописанные модели рассмотрены в рамках абстрактного полулинейного уравнения соболевского типа

$$
L\ \dot{x} = Mx + N(x) + u,\ \ker L \neq \{0\}, \tag{9}
$$

с начальным условием Шоуолтера – Сидорова

$$
L(x(0) - x_0) = 0. \tag{10}
$$

В настоящее время уравнения соболевского типа составляют самостоятельную часть теории неклассических уравнений математической физики. Сформировались научные направления и школы по их изучению как в России, так и за рубежом. Данной области исследования посвящены работы Р.Е. Шоуолтера, А. Фавини, А. Яги, Г.В. Демиденко, С.В. Успенского, Н.А. Сидорова, М.В. Фалалеева, М.О. Корпусова, А.Г. Свешникова, С.Г. Пяткова, А.И. Кожанова, Г.А. Свиридюка, Т.Г. Сукачевой, Ю.Е. Бояринцева, В.Ф. Чистякова, М.В. Булатова, А.А. Замышляевой, С.А. Загребиной, А.В. Келлер, Н.А. Манаковой и других. В 1989 г. Г.А. Свиридюком было высказано предположение о неединственности решений задачи (10) для полулинейных уравнений соболевского типа, что привело к необходимости исследования таких уравнений методом фазового пространства. Изучению вопроса единственности решений и простоты фазового пространства уравнений соболевского типа посвящены работы Г.А. Свиридюка, Т.Г. Сукачевой, М.М. Якупова, В.О. Казака, Н.А. Манаковой и других. Исследование случая, когда фазовое пространство уравнения (9) лежит на банаховом многообразии, имеющем особенности, такие, как сборки или складки Уитни, а значит, задача Шоуолтера – Сидорова (10) для уравнения (9) может иметь несколько решений, началось с работы Т.А. Бокаревой и Г.А. Свиридюка по исследованию математических моделей реакции-диффузии. Работы Г.А. Свиридюка, Т.А. Бокаревой, А.Ф. Гильмутдиновой, И.К. Тринеевой посвящены нахождению условий, при которых существуют особенности типа сборок или складок Уитни фазового пространства различных уравнений соболевского типа. Исследованию задач оптимального управления для уравнений соболевского типа посвящены работы Г.А. Свиридюка, А.А. Ефремова, А.В. Келлер, А.А. Замышляевой, Н.А. Манаковой, О.Н. Цыпленковой, А.Г. Дылькова, Е.А. Богатыревой и других. Для анализа феномена неединственности решений изучаемых моделей требуется проведение всестороннего исследования параметров систем, позволяющего выявить условия несуществования, единственности или неединственности решений задач с начальным условием Шоуолтера – Сидорова с последующей возможностью оптимального регулирования и в многокомпонетном случае. В связи с этим, исследования, представленные в настоящей диссертации, являются актуальными и могут способствовать развитию современной кинетической химии и биофизики.

Целью работы является разработка аналитических и численных методов исследования вырожденных математических моделей автокаталитической реакции с диффузией и распространения нервного импульса в мембранной оболочке с реализацией алгоритмов в виде программных комплексов для проведения вычислительных экспериментов по оцениванию состояний исследуемых систем.

Для достижения этой цели необходимо решить следующие **задачи**:

1. Разработать аналитический метод и провести исследование вырожденных математических моделей автокаталитической реакции с диффузией и распространения нервного импульса в мембранной оболочке.

2. Разработать численный метод нахождения решений вырожденных математических моделей автокаталитической реакции с диффузией и распространения нервного импульса в мембранной оболочке.

3. Разработать программное обеспечение и провести вычислительные эксперименты, иллюстрирующие феномен неединственности решений вырожденных математических моделей автокаталитической реакции с диффузией и распространения нервного импульса в мембранной оболочке, для оценки состояний исследуемых систем.

4. Разработать аналитический метод и провести исследование вырожденной многокомпонентной математической модели оптимального регулирования процесса распространения нервного импульса в мембранной оболочке как задачи оптимального управления.

5. Разработать алгоритм численного метода нахождения управления решениями вырожденной многокомпонентной математической модели распространения нервного импульса в мембранной оболочке.

6. Разработать программное обеспечение, позволяющее провести вычислитель-

ные эксперименты для вырожденной многокомпонентной математической модели оптимального регулирования процесса распространения нервного импульса в мембранной оболочке, для оценки состояний исследуемых систем.

Научная новизна

В области математического моделирования. Исследованы вырожденные математические модели автокаталитической реакции с диффузией и распространения нервного импульса в мембранной оболочке, фазовые пространства которых имеют особенности – складку и сборку Уитни, соответственно; установлена связь между наличием особенностей фазового пространства и неединственностью или несуществованием решений. Впервые найдены условия на начальные данные и параметры моделей, при которых задача имеет одно или несколько решений.
В области численных методов. Разработан и применен численный метод нахождения решений вырожденных математических моделей автокаталитической реакции с диффузией и распространения нервного импульса в мембранной оболочке для оценки состояний исследуемых систем.
В области комплексов программ. Разработаны программные комплексы и проведены вычислительные эксперименты для исследуемых моделей с использованием методов параллельных вычислений в процедуре поиска нескольких решений.
В области системного анализа, управления и обработки информации. Разработан аналитический метод и проведено исследование вырожденной многокомпонентной математической модели оптимального регулирования процесса распространения нервного импульса в мембранной оболочке как задачи оптимального управления; разработан алгоритм численного метода нахождения управления решениями вырожденной многокомпонентной математической модели распространения нервного импульса в мембранной оболочке; разработано программное обеспечение и проведены вычислительные эксперименты для вырожденной многокомпонентной математической модели оптимального регулирования процесса распространения нервного импульса в мембранной оболочке.

Методология и методы диссертационного исследования. Основным методом, использованным в данной работе, является метод фазового пространства, разработанный Г.А. Свиридюком. Исследование основано на использовании современных подходов математического моделирования, функционального анализа, теории оптимального управления и системного анализа. Для численного исследования рассмотренных задач используются модифицированный метод Галеркина – Петрова, методы Ритца и Рунге – Кутты.

Теоретическая и практическая значимость. Результаты диссертационного исследования носят теоретический и практический характер. В рамках теоретической значимости впервые решена задача поиска условий неединственности решений вырожденных моделей типа реакции-диффузии, задача поиска оптимального управляющего воздействия на систему с применением современного математического аппарата. Полученные результаты развивают теории полулинейных уравнений соболевского типа и оптимального управления. В рамках практической значимости разработаны и реализованы численные методы нахождения решений вырожденных математических моделей автокаталитической реакции с диффузией и распространения нервного импульса в мембранной оболочке, позволяющие применять распараллеливание вычислений, что создает основу для моделирования в кинетической химии и биофизике. Представленные результаты вычислительных экспериментов согласуются с результатами проведенного математического моделирования, построенный численный метод может быть применен для дальнейшего развития исследований моделей типа реакции-диффузии.

Апробация работы. Результаты диссертации были представлены на международной научной конференции «Уфимская осенняя математическая школа» (г. Уфа, 2019), XIII Всероссийском совещании по проблемам управления ВСПУ (г. Москва, 2019), XIV Всероссийской школе-конференции молодых ученых (г. Пермь, 2017), XVIII Всероссийском симпозиуме по прикладной и промышленной математике, осенняя сессия (г. Сочи, 2017), Международной научной конференции «Математические методы в технике и технологиях-32» (г. Санкт-Петербург, 2016), XII Всероссийской школе-конференции молодых ученых (г. Волгоград, 2015), II Южно-Уральской молодежной школе по математическому моделированию-2015 (г. Челябинск, 2015). Результаты докладывались на семинарах «Уравнения соболевского типа» профессора Г.А. Свиридюка в Южно-Уральском государственном университете (г. Челябинск).

Степень достоверности результатов. Достоверность научных результатов и выводов обеспечены корректным использованием методов математического моделирования, системного анализа, полученные результаты подтверждаются математическими доказательствами, соответствующими современному уровню строгости, согласованием результатов вычислительных экспериментов с теоретическими положениями. Все результаты представлены и апробированы на научных конференциях и семинарах. Результаты и выводы не противоречат ранее полученным результатам других авторов. Все результаты, выносимые на защиту, опубликованы.

Публикации. Материалы диссертации опубликованы в 16 научных работах, из них шесть статей [1–6] – в рецензируемых журналах из перечня ВАК, в том числе, две статьи – в рецензируемом издании из наукометрических баз Scopus и Web of Science; одна зарегистрированная компьютерная программа [7] и один программный комплекс [8]. В совместных с научным руководителем работах научному руководителю принадлежит постановка задачи, на защиту выносятся только результаты, полученные ее автором и не затрагивают интересы соавторов.

Структура и объем работы. Диссертационная работа, помимо введения, заключения, списка литературы и двух приложений, содержит три главы. Объем диссертации составляет 145 страниц. Список литературы содержит 106 наименований.

Краткое содержание диссертации

Во введении приводится постановка задачи, формируется цель и задачи исследования, обосновывается актуальность, теоретическая и практическая значимость проведенного исследования, определяются методы исследования и новизна полученных результатов, дается характеристика степени разработанности проблемы и степени достоверности результатов, представлена апробация результатов.

Первая глава состоит из семи параграфов и посвящена разработке методов и алгоритмов системного исследования вопросов несуществования, единственности или неединственности решения задачи Шоуолтера – Сидорова для вырожденной математической модели автокаталитической реакции с диффузией. Первый параграф содержит формулировки классических теорем и определений, которые используются для получения основных результатов диссертации, и имеет вспомогательный характер. Во втором параграфе рассмотрена математическая модель автокаталитический реакции с диффузией (1) – (3) в случае $\varepsilon_1 = 0$. Третий параграф посвящен исследованию вопросов несуществования, единственности или неединственности решения задачи (1) – (3) в случае $\varepsilon_1 = 0$. Пусть пространство $\mathfrak{X}_\alpha = \mathfrak{X}_1^0 \oplus \mathfrak{X}_\alpha^1$, где $\mathfrak{X}_\alpha^1 = \{0\} \times \mathfrak{X}^\alpha$, $\mathfrak{X}_1^0 = \overset{\circ}{W}{}_2^1(\Omega) \times \{0\}$, $\mathfrak{X}^\alpha = L_4(\Omega)$. В силу вырожденности уравнения (9) все его решения лежат поточечно во множестве $\mathfrak{P}_{\varepsilon_1} = \{x \in \mathfrak{X}_\alpha : \langle \alpha_1 v_{s_i}, \xi_{s_i} \rangle = \langle \beta_1 - (\beta_2 + 1)v + v^2 w, \xi \rangle\}$. Возьмем произвольную точку $x = (v, w) \in \mathfrak{X}_\alpha$, представим x в виде $x = (v^\perp + r\varphi_k, w^\perp)$, где $x^\perp = (v^\perp, w^\perp) \in \mathfrak{X}_\alpha^\perp$, $v^\perp \in \mathfrak{H}_1^\perp$, $w^\perp \in (\mathfrak{X}^\alpha)^\perp$, $\mathfrak{H}_1^\perp = \{v \in \overset{\circ}{W}{}_2^1(\Omega) : \langle v^\perp, \varphi_k \rangle = 0\}$, $(\mathfrak{X}^\alpha)^\perp = \{w^\perp \in \mathfrak{X}^\alpha : \langle w^\perp, \varphi_k \rangle = 0\}$, здесь $\{\varphi_k\}$, $\{\nu_k\}$ – собственные функции и собственные значения однородной задачи Дирихле для оператора Лапласа $(-\Delta)$, для которых выполняется $\dim\ker(\nu_k \mathbb{I} + \Delta) = 1$. Введем функционал $\mathfrak{Res}(v^\perp) : \mathfrak{H}_1^\perp \to \mathbb{R}$ вида

$$\mathfrak{Res}(v^\perp) = 4\left(\int\limits_\Omega (v^\perp)^2 w^\perp \varphi_k^2 ds\right)^2 - 4\int\limits_\Omega w^\perp \varphi_k^3 ds \left(\int\limits_\Omega (v^\perp)^2 w^\perp \varphi_k ds + \int\limits_\Omega \beta_1 \varphi_k ds\right)$$

и рассмотрим множества $(\mathfrak{H}_1^\perp)_+ = \{v^\perp \in \mathfrak{H}_1^\perp : \mathfrak{Res}(v^\perp) > 0\}$, $(\mathfrak{H}_1^\perp)_- = \{v^\perp \in \mathfrak{H}_1^\perp : \mathfrak{Res}(v^\perp) < 0\}$, $(\mathfrak{H}_1^\perp)_0 = \{v^\perp \in \mathfrak{H}_1^\perp : \mathfrak{Res}(v^\perp) = 0\}$. Построим множества

$$\begin{aligned} \mathfrak{P}_{\varepsilon_1 -} &= \left\{ x \in \mathfrak{X}_\alpha : \begin{cases} \langle \alpha_1 v_{s_i}^\perp, \xi_{s_i}^\perp \rangle = \langle \beta_1 - (\beta_2 + 1)v^\perp + (v^\perp + r\varphi_k)^2 w^\perp, \xi^\perp \rangle, \\ v = r_-(v^\perp)\varphi_k + v^\perp \end{cases} \right\}, \\ \mathfrak{P}_{\varepsilon_1 +} &= \left\{ x \in \mathfrak{X}_\alpha : \begin{cases} \langle \alpha_1 v_{s_i}^\perp, \xi_{s_i}^\perp \rangle = \langle \beta_1 - (\beta_2 + 1)v^\perp + (v^\perp + r\varphi_k)^2 w^\perp, \xi^\perp \rangle, \\ v = r_+(v^\perp)\varphi_k + v^\perp \end{cases} \right\}. \end{aligned} \tag{11}$$

Теорема 1. (1.3.1)[5] Если $\alpha_1, \alpha_2 \in \mathbb{R}\backslash\{0\}$, $\beta_1, \beta_2 \in \mathbb{R}$, $n \le 4$, то фазовом пространством (1), (2) является множество $\mathfrak{P}_{\varepsilon_1 -} \cup \mathfrak{P}_{\varepsilon_1 +}$, которое содержит 1-сборку Уитни.

Теорема 2. (1.3.2) Для всех фиксированных параметров $\alpha_1, \alpha_2 \in \mathbb{R}\backslash\{0\}$, $\beta_1, \beta_2 \in \mathbb{R}$, $n \le 4$, и
(i) любого $x_0 \in (\mathfrak{H}_1^{\perp})_+ \times (\mathfrak{X}^{\alpha})^{\perp}$ существует два решения задачи (1) – (3);
(ii) любого $x_0 \in (\mathfrak{H}_1^{\perp})_0 \times (\mathfrak{X}^{\alpha})^{\perp}$ существует одно решение задачи (1) – (3);
(iii) любого $x_0 \in (\mathfrak{H}_1^{\perp})_- \times (\mathfrak{X}^{\alpha})^{\perp}$ задача (1) – (3) неразрешима.

В четвертом параграфе представлена математическая модель автокаталитической реакции с диффузией в случае $\varepsilon_2 = 0$, доказана единственность решения задачи (1) – (3). Построено фазовое пространство (1), (2) для случая $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 0$. В пятом параграфе рассмотрена модель автокаталитической реакции с диффузией в трубчатом реакторе в случае $\varepsilon_1 = 0$ или $\varepsilon_2 = 0$, найдены условия существования одного, двух или несуществования решений на конечном связном ориентированном графе $\mathbf{G}$. В шестом параграфе содержится описание алгоритма численного метода нахождения решения задачи Шоуолтера – Сидорова на основе модифицированного метода Галеркина – Петрова и метода фазового пространства, описание комплекса программ на ЭВМ, разработанного в вычислительной среде Maple 2017. Седьмой параграф содержит результаты вычислительных экспериментов в области Ω (рассмотрен случай отрезка, прямоугольника) и на конечном связном ориентированном графе $\mathbf{G}$ для оценки состояний исследуемых систем.

Пример 1. Рассмотрим задачу (1) – (3) в случае $\varepsilon_1 = 0$ и $\alpha_1 = \frac{1}{10}$, $\alpha_2 = 2$, $\beta_1 = 1$, $\beta_2 = -\frac{9}{10}$, $\Omega = (0, \pi)$, $T = 1$, $w_0(s) = \sqrt{\frac{2}{\pi}}(\sin(3s) + \sin(2s) + \sin(s))$. Представим приближенные решения задачи (1) – (3) как $\tilde{v}(s,t) = \sum\limits_{i=1}^{m} v_i(t)\sqrt{\frac{2}{\pi}}\sin(is)$, $\tilde{w}(s,t) = \sum\limits_{i=1}^{m} w_i(t)\sqrt{\frac{2}{\pi}}\sin(is)$. Согласно теореме 2 задача (1) – (3) при заданном значении функции $w_0(s)$ будет иметь два решения. Численное решение, соответствующее набору начальных условий (v_{01}, w_0), представлено на рис. 1 а), отличное от него численное решение, соответствующее набору начальных условий (v_{02}, w_0), представлено на рис. 1 б).

В ходе вычислительных экспериментов был проведен анализ вычислительной точности для каждого из численных решений задачи (1) – (3) при различном количестве приближений m.

Вторая глава состоит из семи параграфов и посвящена разработке методов и алгоритмов системного исследования вопросов несуществования, единственности или неединственности решения задачи Шоуолтера – Сидорова для вырожден-

[5]В скобках указана нумерация в диссертации.

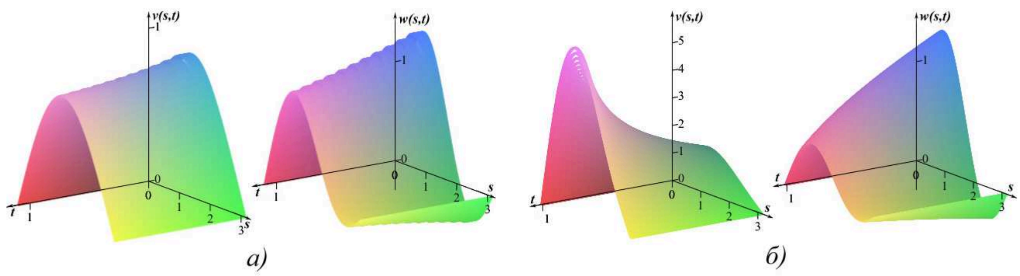

Рис. 1. Численные решения задачи (1) – (3)

ной математической модели распространения нервного импульса в мембранной оболочке. В первом параграфе рассмотрена математическая модель распространения нервного импульса в мембранной оболочке (2) – (4) в случае $\varepsilon_1 = 0$, доказана теорема о том, что задача (2) – (4) в случае $\varepsilon_1 = 0$ имеет единственное решение. Во втором параграфе представлено исследование математической модели (2) – (4) в случае $\varepsilon_2 = 0$ и найдены условия существования единственного решения. В третьем параграфе найдены условия, при которых задача (2) – (4) в случае $\varepsilon_2 = 0$ имеет одно или три различных решения. Пусть $\mathfrak{X}_\alpha = \mathfrak{X}_1^0 \oplus \mathfrak{X}_\alpha^1$, где $\mathfrak{X}_1^0 = \{0\} \times W_2^1(\Omega)$, $\mathfrak{X}_\alpha^1 = \mathfrak{X}^\alpha \times \{0\}$. Рассмотрим случай $\beta_{22} = \alpha_2\nu_1$, положим $\mathfrak{X}^{\alpha\perp} = \{v^\perp \in \mathfrak{X}^\alpha : \langle v^\perp, \varphi_1\rangle = 0\}$, $\mathfrak{H}_2^\perp = \{w^\perp \in \mathfrak{H}_2 : \langle w^\perp, \varphi_1\rangle = 0\}$ и $x = (v, w) \in \mathfrak{X}_\alpha$ представим в виде $v = v^\perp + r\varphi_1$ и $w = w^\perp + q\varphi_1$, где $r, q \in \mathbb{R}$. Построим функционалы $\mathfrak{Res}(q, w^\perp) = p^3 + e^2$, $R(q, w^\perp) = q^2\|\varphi_1\|^4_{L_4(\Omega)} + 2q\int\limits_\Omega \varphi_1^3 w^\perp ds + \int\limits_\Omega \varphi_1^2 (w^\perp)^2 ds$. Введем следующие множества $\mathfrak{H}_2^0 = \{w \in \mathfrak{H}_2 : R(q, w^\perp) = 0\}$, $\mathfrak{H}_2^+ = \{w \in \mathfrak{H}_2 : \mathfrak{Res}(q, w^\perp) > 0\}$, $\mathfrak{H}_2^- = \{w \in \mathfrak{H}_2 : \mathfrak{Res}(q, w^\perp) < 0\}$.

Теорема 3. (2.3.2) При любых $\alpha_1, \beta_{11}, \beta_{12} \in \mathbb{R}, \alpha_2, \beta_{21} \in \mathbb{R}_+, \beta_{22} = \alpha_2\nu_1, n \leq 4$, и
(i) любого $v_0 \in \mathfrak{X}^\alpha \bigcap {\mathfrak{H}_2}^-$ существует одно решение задачи (2) – (4);
(ii) любого $v_0 \in \mathfrak{X}^\alpha \bigcap {\mathfrak{H}_2}^+$ существует три решения задачи (2) – (4).

В четвертом параграфе рассмотрена модель распространения нервного импульса в мембранной оболочке системы нервов в случае $\varepsilon_1 = 0$ или $\varepsilon_2 = 0$, найдены условия существования одного или трех решений. В пятом параграфе содержится описание алгоритма численного метода нахождения решения задачи Шоуолтера – Сидорова. В шестом параграфе описан комплекс программ для ЭВМ, разработанный в вычислительной среде Maple 2017. Седьмой параграф содержит результаты вычислительных экспериментов в области Ω и на конечном связном ориентированном графе $\mathbf{G}$.

Третья глава состоит из шести параграфов и посвящена разработке методов и алгоритмов нахождения управления процессом распространения нервного импульса в мембранной оболочке на основе задачи оптимального управления. В первом параграфе проводится исследование математической модели (5) – (7), где матрица коэффициентов $B = \{\beta_{ij}\}_{i,j=1}^m$ обладает свойством

$$\exists C_B, C^B > 0 : C_B\,[x, x] \leq [Bx, x] \leq C^B\,[x, x]. \tag{12}$$

Второй параграф содержит аналитическое исследование задачи оптимального управления для модели распространения нервного импульса в мембранной оболочке. Построим пространства $\mathfrak{X} = \{v_i \in L_\infty(0,T;W_2^1(\Omega)) \cap L_4(0,T;L_4(\Omega)), \frac{dv_i}{dt} \in L_2(0,T;W_2^1(\Omega)), i = \overline{1,k};\ v_i \in L_\infty(0,T;W_2^1(\Omega)) \cap L_2(0,T;W_2^1(\Omega)), i = \overline{k+1,m}\}$; $\mathfrak{U} = \{u = (u_1, u_2, ..., u_m) : u_i \in L_{\frac{4}{3}}(0,T;L_{\frac{4}{3}}(\Omega)), i = 1, \ldots, k; u_i \in L_2(0,T;W_2^{-1}(\Omega)),$ $i = k+1, ..., m\}$. Выберем $\mathfrak{U}_{ad} \subset \mathfrak{U}$ – непустое, замкнутое, выпуклое множество. Рассмотрим задачу оптимального управления (8), где целевой функционал зададим в виде

$$\begin{gathered} J(x,u) = \vartheta \sum_{i=1}^{k} \int_0^T \|v_i - v_i^{dop}\|^4_{L_4(\Omega)}\, dt + \vartheta \sum_{i=k+1}^{m} \int_0^T \|v_i - v_i^{dop}\|^2_{W_2^1(\Omega)}\, dt + \\ +(1-\vartheta) \sum_{i=1}^{k} \int_0^T \|u_i\|^{\frac{4}{3}}_{L_{\frac{4}{3}}(\Omega)}\, dt + (1-\vartheta) \sum_{i=k+1}^{m} \int_0^T \|u_i\|^2_{W_2^{-1}(\Omega)}\, dt,\ \vartheta \in (0,1), \end{gathered} \tag{13}$$

где $x^{dop} = (v_1^{dop}, v_2^{dop}, \ldots, v_m^{dop})$ – требуемое состояние системы.

Определение 1. (3.2.2) Пару $(\tilde{x}, \tilde{u}) \in \mathfrak{X} \times \mathfrak{U}_{ad}$ назовем *решением задачи оптимального управления* (5) – (8), если $J(\tilde{x}, \tilde{u}) = \inf\limits_{(x,u)} J(x,u)$, где пары $(x,u) \in \mathfrak{X} \times \mathfrak{U}_{ad}$ удовлетворяют (5) – (7) в слабо обобщенном смысле; вектор-функцию $\tilde{u}$ назовем *оптимальным управлением.*

Теорема 4. (3.2.2) Пусть $\alpha_i \in \mathbb{R}_+$, $i = 1, ..., m$, $\varkappa_i \in \mathbb{R}_+$, $i = 1, ..., k$, $n \le 4$, и выполнено условие (12), тогда при любых $v_{0i} \in L_4(\Omega)$, $i = \overline{1,k}$, $T \in \mathbb{R}_+$ существует оптимальное управление в задаче (5) – (8).

В третьем параграфе содержится описание метода нахождения управления решениями задачи (5) – (8), основанный на методах декомпозиции и штрафа, который заключается в построении эквивалентной задачи оптимального управления относительно тройки искомых функций (x, y, u)

$$\begin{gathered} L\dot{x} + Mx + N(y) = u, \\ v_i(u_i, y_i) = y_i, u \in \mathfrak{U}_{ad}, y_i \in L_4(0,T,L_4(\Omega)), i = \overline{1,k}, \end{gathered} \tag{14}$$

с условиями (6), (7) и

$$\begin{gathered} J_\theta^\varepsilon(x,u,y) = \theta\vartheta \sum_{i=1}^{k} \int_0^T \|v_i(t) - v_i^{dop}(t)\|^4_{L_4(\Omega)} dt + (1-\theta)\vartheta \sum_{i=1}^{k} \int_0^T \|y_i(t) - v_i^{dop}(t)\|^4_{L_4(\Omega)} dt + \\ +\vartheta \sum_{i=k+1}^{m} \int_0^T \|v_i(t) - v_i^{dop}(t)\|^2_{W_2^1(\Omega)} dt + (1-\vartheta) \sum_{i=1}^{k} \int_0^T \|u_i(t)\|^{\frac{4}{3}}_{L_{\frac{4}{3}}(\Omega)} dt + \\ +(1-\vartheta) \sum_{i=k+1}^{m} \int_0^T \|u_i(t)\|^2_{W_2^{-1}(\Omega)} dt + r_\varepsilon \sum_{i=1}^{k} \int_0^T \|v_i - y_i\|^4_{L_2(\Omega)} \to \inf, \end{gathered} \tag{15}$$

где $\theta \in (0,1)$, $r_\varepsilon = \frac{1}{\varepsilon} \to +\infty$ при $\varepsilon \to +0$ – параметр штрафа.

Теорема 5. (3.3.2) Пусть $\alpha_i \in \mathbb{R}_+$, $i = \overline{1,m}$, $\varkappa_i \in \mathbb{R}_+$, $i = \overline{1,k}$, $n \le 4$, и выполнено условие (12), тогда при любых $v_{0i} \in L_4(\Omega)$, $i = \overline{1,k}$, $T \in \mathbb{R}_+$, существует решение задачи (14), (15).

Четвертый параграф содержит аналитическое исследование задачи оптимального управления для модели распространения нервного импульса в мембранной оболочке системы нервов. Пятый параграф посвящен описанию алгоритма численного метода нахождения управления и содержит описание комплекса программ на ЭВМ, разработанного в вычислительной среде Maple 2017. Приведем основные этапы данного алгоритма.

Этап 1. Находим собственные функции $\{\varphi_k(s)\}$ однородной задачи Дирихле для оператора Лапласа $(-\Delta)$.

Этап 2. Для линеаризации системы уравнений (5) введем функций $y_i = y_i(s,t)$, $i=\overline{1,k}$, и получим задачу, эквивалентную исходной.

Этап 3. Следуя методу Галеркина – Петрова, представим приближенное решение $\tilde{x} = (\tilde{v}_1, \tilde{v}_2, ..., \tilde{v}_m)$, $\tilde{y} = (\tilde{y}_1, \tilde{y}_2, ..., \tilde{y}_k)$ задачи (14), (15) и управления $u_i(s,t)$, $i=\overline{1,m}$, стоящие в правой части уравнений системы (14), в виде сумм

$$\begin{gathered}\tilde{v}_i^h(s,t) = \sum_{p=1}^{h} v_{i_p}(t)\varphi_p(s), \tilde{u}_i^h(s,t) = \sum_{p=1}^{h} u_{i_p}(t)\varphi_p(s), i=\overline{1,m},\\ \tilde{y}_i^h(s,t) = \sum_{p=1}^{h} y_{i_p}(t)\varphi_p(s), i=\overline{1,k}.\end{gathered} \tag{16}$$

Этап 4. Опираясь на метод Ритца, представим неизвестные функции $y_{i_p}(t)$, $i=\overline{1,k}, u_{i_p}(t), p=\overline{1,h}, i=\overline{1,m},$ через разложения $y_{i_p}(t,H) = \displaystyle\sum_{g=1}^{H} b_{i_{p,g}} t^g$, $u_{i_p}(t,H) = \displaystyle\sum_{g=0}^{H} c_{i_{p,g}} t^g$, учитывая, что $y_i(0) = v_i(0)$, $i=\overline{1,k}$.

Этап 5. Для нахождения неизвестных $v_{i_p}(t)$ подставим галеркинские суммы (16) в систему уравнений (14), а затем умножив полученную систему уравнений скалярно в $L_2(\Omega)$ на собственные функции $\varphi_p(s)$, получим систему алгебро-дифференциальных уравнений. Разрешим получившуюся систему уравнений относительно неизвестных $b_{i_{p,g}}$, $i=\overline{1,k}$, $g=\overline{1,H}$, $c_{i_{p,g}}$, $i=\overline{1,m}$, $g=\overline{0,H}$, $p=\overline{1,h}$, с учетом условий Шоуолтера – Сидорова.

Этап 6. Подставим получившиеся $v_{i_p}(t)$ в целевой функционал (15). Таким образом, задача оптимального управления сводится к нахождению минимума функции нескольких переменных относительно $b_{i_{p,g}}$, $c_{i_{p,g}}$.

Этап 7. Находя минимум функционала (15), получим значения $b_{i_{p,g}}, c_{i_{p,g}}$. Подставив найденные значения в (16), получим приближенное решение задачи (5) – (8).

Аналогичным образом строится алгоритм нахождения управления решениями задачи (5) – (8) на конечном связном ориентированном графе $\mathbf{G}$.

Шестой параграф содержит результаты вычислительных экспериментов в области Ω и на конечном связном ориентированном графе $\mathbf{G}$.

Пример 2. Требуется найти численное решение задачи оптимального управления (5) – (8), если $m = 4$, $k = 3$, $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3 = \alpha_4 = 1$, $\beta_{11} = \beta_{12} = \beta_{13} = \beta_{14} = \beta_{22} = \beta_{23} = \beta_{24} = \beta_{33} = \beta_{33} = \beta_{44} = 1$, $\beta_{21} = \beta_{31} = \beta_{32} = \beta_{41} = \beta_{42} = \beta_{43} = -1$, $\Omega = (0, \pi)$, $T = 1$, $\theta = \frac{1}{2}$, $\vartheta = \frac{99}{100}$, $\varepsilon = \frac{1}{100}$, $v_{i0}(s) = \sqrt{\frac{2}{\pi}}(\sin(s) + \sin(2s))$, $i = \overline{1,3}$, $v_i^{dop}(s,t) = \sqrt{\frac{2}{\pi}}(\sin(s) + \sin(2s))$, $i = \overline{1,4}$.

Заметим, что для матрицы коэффициентов B выполняется условие (12). Функцию, стоящую в правой части в системе уравнений (5), и приближенные решения задачи (14) представим в виде $\tilde{u}_i(s,t) = \sum\limits_{p=1}^{h} u_{i_p}(t)\varphi_p(s), \tilde{v}_i(s,t) = \sum\limits_{p=1}^{h} v_{i_p}(t)\varphi_p(s)$, $i = \overline{1,4}$, $\tilde{y}_i(s,t) = \sum\limits_{p=1}^{h} y_{i_p}(t)\varphi_p(s)$, $i = \overline{1,3}$, где $\varphi_p(s) = \sqrt{\frac{2}{\pi}}\sin(ps)$. В результате работы программного комплекса были найдены коэффициенты управления. График управления представлен на рис. 2 в момент времени $t = 1$. Полученные приближенные решения $\tilde{v}_i$, $i = \overline{1,4}$ и $\tilde{y}_i$, $i = \overline{1,3}$, задачи (5) – (8) представлены на рис. 3 в момент времени $t = 1$. Для оценки точности работы алгоритма было получено решение $w(s,t)$ задачи (5) – (7) при найденной вектор-функции $u(s,t)$. На рис. 3 видно, что требуемое состояние системы $v_i^{dop}(s,t)$ в интегральном смысле мало отличается от найденного состояния $\tilde{v}_i(s,t)$, а функции $\tilde{v}_i(s,t)$, $\tilde{y}_i(s,t)$ и $w_i(s,t)$ близки друг к другу.

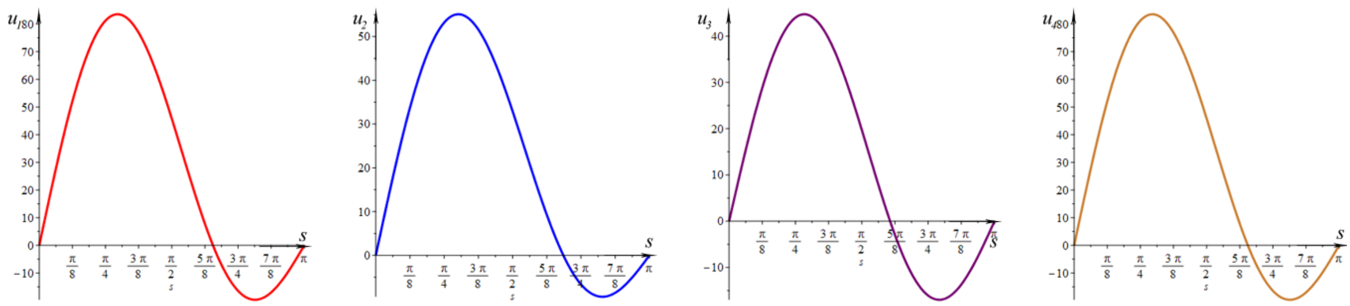

Рис. 2. Функции управления задачи (5) – (8)

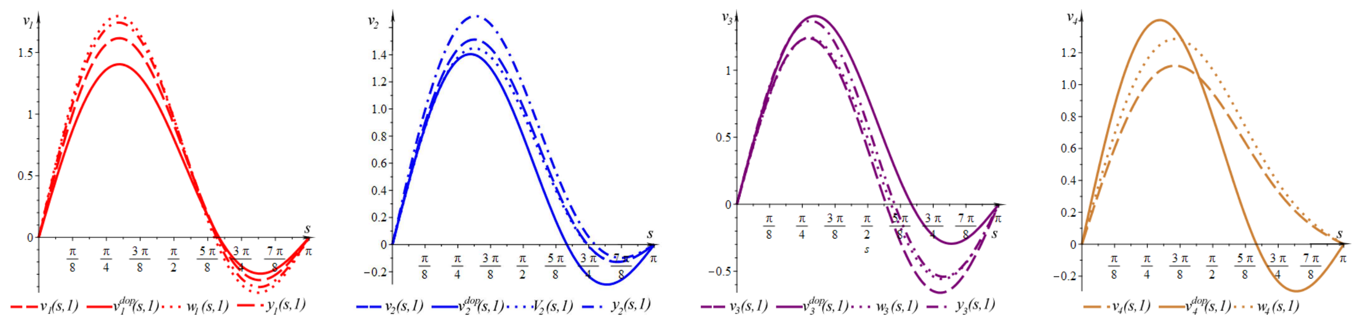

Рис. 3. Численное решение задачи (5) – (8)

В заключении обобщаются и подводятся итоги выполненного исследования, представлены рекомендации и перспективы дальнейшей разработки темы. Отмечается, что цель исследования достигнута, все поставленные задачи решены. Таким образом, в соответствии с задачами были получены следующие **результаты, выносимые на защиту**:

– *в рамках развития качественных и приближенных аналитических методов исследования математических моделей (п. 2)* получены аналитический метод исследования вырожденной математической модели автокаталитической реакции с диффузией в кювете или трубчатом реакторе; аналитический метод исследования вырожденной математической модели распространения нервного импульса в мембранной оболочке нерва или системы нервов;

– *в рамках разработки, обоснования и тестирования эффективных вычислительных методов с применением современных компьютерных технологий (п. 3)* получен алгоритм численного метода нахождения множества приближенных решений вырожденных математических моделей распространения нервного импульса в мембранной оболочке и автокаталитической реакции с диффузией;

– *в рамках реализации эффективных численных методов и алгоритмов в виде комплексов проблемно-ориентированных программ для проведения вычислительных экспериментов (п. 4)* получены комплекс программ для ЭВМ, реализующий алгоритм нахождения приближенных решений вырожденной математической модели распространения нервного импульса в мембранной оболочке; комплекс программ для ЭВМ, реализующий алгоритм нахождения приближенных решений вырожденной математической модели автокаталитической реакции с диффузией;

– *в рамках разработки методов и алгоритмов решения задач системного анализа, оптимизации, управления, принятия решений и обработки информации (п. 4)* получены аналитический метод исследования задачи оптимального управления для многокомпонентной математической модели распространения нервного импульса в мембранной оболочке нерва или системы нервов; алгоритм численного метода нахождения управления решениями вырожденной многокомпонентной математической модели распространения нервного импульса в мембранной оболочке для оценки состояний исследуемых систем; комплекс программ для ЭВМ, реализующий алгоритм нахождения приближенных решений задачи оптимального управления для вырожденной многокомпонентной математической модели распространения нервного импульса в мембранной оболочке.

Основные публикации автора по теме диссертации

Статьи, опубликованные в ведущих российских рецензируемых научных журналах, рекомендованных ВАК при Министерстве науки и высшего образования РФ, и в рецензируемых научных журналах и изданиях, индексируемых Scopus и Web of Science:

1. Манакова, Н.А. Оптимальное управление для одной математической модели распространения нервного импульса / Н.А. Манакова, **О.В. Гаврилова**

// Вестник ЮУрГУ. Серия: Математическое моделирование и программирование. – 2015. – Т. 8, № 4. – С. 120–126. (ВАК, Scopus, Web of Science)

2. Manakova, N.A. About Nonuniqueness of Solutions of the Showalter – Sidorov Problem for One Mathematical Model of Nerve Impulse Spread in Membrane / N.A. Manakova, **O.V. Gavrilova** // Вестник ЮУрГУ. Серия: Математическое моделирование и программирование. – 2018. – Т. 11, № 4. – С. 161–168. (ВАК, Scopus, Web of Science)

3. Gavrilova, O.V. Numerical Study of a Mathematical Model of an Autocatalytic Reaction with Diffusion in a Tubular Reactor / O.V. Gavrilova // Journal of Computational and Engineering Mathematics. – 2018. – V. 5, № 3. – P. 24–37. (ВАК)

4. Gavrilova, O.V. Numerical Study on the Non-Uniqueness of Solutions to the Showalter – Sidorov Problem for one Degenerate Mathematical Model of an Autocatalytic Reaction with Diffusion / O.V. Gavrilova // Journal of Computational and Engineering Mathematics. – 2019. – V. 6, № 4. – P. 3–17. (ВАК)

5. Gavrilova, O.V. Optimal Control Over Solutions of a Multicomponent Model of Reaction-Diffusion in a Tubular Reactor / O.V. Gavrilova // Вестник ЮУрГУ. Серия: Математика. Механика. Физика. – 2020. – Т. 12, № 1. – С. 14–23. (ВАК, RSCI)

6. Gavrilova, O.V. A Numerical Study of the Optimal Control Problem for Degenerate Multicomponent Mathematical Model of the Propagation of a Nerve Impulse in the System of Nerves / O.V. Gavrilova // Journal of Computational and Engineering Mathematics. – 2020. – V. 7, № 1. – P. 47–61. (ВАК)

Свидетельства о регистрации программы:

7. Численное моделирование распространения нервного импульса в прямоугольной мембране: Свидетельство № 2019660879 / Гаврилова О.В. (RU); правообладатель ФГБОУ ВПО «Южно-Уральский государственный университет (НИУ)». – 2019660879; заявл. 08.08.2019; зарегистр. 14.08.2019, реестр программ для ЭВМ.

8. Программный комплекс численного исследования оптимального регулирования для модели распространения импульса в системе нервов: Свидетельство № 2019660880 / Манакова Н.А., **Гаврилова О.В.** (RU); правообладатель ФГБОУ ВПО «Южно-Уральский государственный университет (НИУ)». – 2019660883; заявл. 08.08.2019; зарегистр. 14.08.2019, реестр программ для ЭВМ.

Издательский центр Южно-Уральского государственного университета
Подписано в печать 27.04.2021. Формат 60×84 1/16. Печать цифровая.
Усл. печ. л. 0,93. Тираж 120 экз. Заказ 108/185.
Отпечатано в типографии Издательского центра ЮУрГУ.
454080, г. Челябинск, пр. им. В.И. Ленина, 76.