

Структуроохраняющая схема для двухфазной конвективно–реакционно–диффузационной системы

А. Элмуродов и А. Сотволдиев

Аннотация

В данной работе предложена новая явная численная схема, сохраняющая структуру, для двухфазной конвективно–реакционно–диффузационной системы с динамически эволюционирующей межфазной границей. Для решения и свободной границы получены априорные оценки в нормах Гёльдера, что позволяет доказать существование и единственность классического решения, а также исследовать его качественные свойства. Проведён сравнительный анализ трёх численных подходов: неявной противоточной схемы, схемы Кранка–Николсона и предложенной явной схемы. Численные эксперименты подтверждают рабочесть и устойчивость нового метода, в том числе в режимах с преобладающей адвекцией и сильно нелинейными реакционными членами. Предложенная схема обеспечивает физически корректные результаты и может быть эффективно использована для моделирования процессов, управляемых движущимися интерфейсами, возникающих, в частности, при остеointеграции вокруг зубных имплантатов, биологической инвазии и фазовых переходах с резкой границей.

Ключевые слова: задача со свободной границей, адвекция, реакция, диффузия, структуроохраняющий метод, устойчивость, численное моделирование.

Предметная классификация AMS (2020): Основная: 35B45 ; Дополнительная: 35K20; 35K57; 35K59.

1. Введение

Уравнения конвекции–реакции–диффузии занимают ключевое место в математическом моделировании широкого круга сложных процессов в физике, химии, биологии и инженерных науках. В последние годы они активно используются для описания пространственного распределения видов в экологии [1], [2], [3], [4], [5], динамики концентраций в химических реакциях [6], [7], [8], распространения сигналов в биологических тканях [9], а также, сравнительно недавно, для моделирования эволюции тканей вокруг биомедицинских имплантатов [10], [11]. Подобные модели применяются и при исследовании ряда других родственных процессов. В общем одномерном случае уравнение конвекции–реакции–диффузии с нелинейным реакционным членом может быть записано в виде

$$\partial_t w = \nabla \cdot (\mathbf{D} \nabla w) - \mathbf{c} \cdot \nabla w + f(w),$$

где w обозначает концентрацию вещества или плотность популяции, \mathbf{c} — скорость адвекции (массового переноса), \mathbf{D} — тензор диффузии, а $f(w)$ — нелинейный реакционный член, описывающий локальную кинетику процесса.

В настоящей работе рассматривается двухфазная система конвекции–реакции–диффузии, в которой два различных компонента занимают дополняющие друг друга пространственные области, разделённые подвижной

межфазной границей $s(t)$. Полная математическая модель имеет вид

$$u_t - u_{xx} - c_1 u_x = u(a_1 - b_1 u), \quad (x, t) \in D_1, \quad (1.1)$$

$$v_t - v_{xx} - c_2 v_x = v(a_2 - b_2 v), \quad (x, t) \in D_2, \quad (1.2)$$

$$u(x, 0) = u_0(x), \quad -\ell \leq x \leq s(0) = 0, \quad v(x, 0) = v_0(x), \quad s(0) = 0 \leq x \leq \ell, \quad (1.3)$$

$$u(-\ell, t) = \varphi_1(t), \quad u(s(t), t) = v(s(t), t) = 0, \quad v(\ell, t) = \varphi_2(t), \quad 0 \leq t \leq T, \quad (1.4)$$

$$\dot{s}(t) = -\alpha u_x(s(t), t) + \beta v_x(s(t), t), \quad s(0) = 0, \quad 0 \leq t \leq T. \quad (1.5)$$

Здесь области определения заданы как $D_1 = \{(x, t) : 0 < t \leq T, -\ell < x < s(t)\}$ и $D_2 = \{(x, t) : 0 < t \leq T, s(t) < x < \ell\}$. Параметры системы удовлетворяют условиям $a_i, b_i, \alpha, \beta > 0$, $c_i \in \mathbb{R}$. Границные функции φ_1 и φ_2 принадлежат классу $C^{1+\gamma/2}([0, T])$ и являются строго положительными, а начальные профили u_0 и v_0 предполагаются гладкими и согласованными с граничными условиями:

$$\begin{cases} u_0(0) = 0, \quad u_0 \in C^{2+\gamma}([-\ell, 0]), \\ u_0(x) > 0, \quad x \in [-\ell, 0], \quad u_0(-\ell) = \varphi_1(0), \end{cases} \quad \begin{cases} v_0(0) = 0, \quad v_0 \in C^{2+\gamma}([0, \ell]), \\ v_0(x) > 0, \quad x \in (0, \ell], \quad v_0(\ell) = \varphi_2(0). \end{cases}$$

Функции $u(x, t)$ и $v(x, t)$ интерпретируются как концентрации двух веществ либо плотности двух взаимодействующих популяций, например инвазивного и аборигенного видов. Параметры c_1 и c_2 задают скорости адвекции, a_1, a_2 — коэффициенты роста, b_1, b_2 — интенсивности внутривидовой конкуренции, а α и β являются коэффициентами пропорциональности в условиях Стефана. Начальные функции $u_0(x)$ и $v_0(x)$ являются гладкими и положительными, что согласуется с физической постановкой задачи.

На практике многие физические и биологические системы не развиваются в рамках единой однородной фазы. Напротив, они формируются в различных областях, разделённых интерфейсом, положение которого изменяется со временем. Характерным примером служит процесс остеоинтеграции вокруг зубных имплантатов, широко обсуждаемый как в клинических, так и в модельных исследованиях. В этом случае титановый имплантат выступает в роли пассивной, не реагирующей фазы, тогда как прилегающая костная ткань остаётся метаболически активной и динамически адаптивной. Взаимодействие между этими средами локализовано вблизи подвижной границы, скорость которой определяется биофизическими механизмами обратной связи [10].

Подобная двухфазная структура не является исключением. Она возникает и в моделях роста опухолей, где злокачественная ткань вытесняет здоровую [12], а также в классических задачах фазовых переходов, например при замерзании воды, когда фронт фазового перехода распространяется вдоль резкой подвижной границы [13].

С математической точки зрения такие процессы относятся к классу задач со свободной границей, в частности к моделям стефановского типа, в которых скорость движения интерфейса не задаётся априори, а определяется потоками соответствующих переменных состояния. Эта связь отражает физическую или биологическую природу движения границы и является принципиально важной для корректного описания динамики системы.

Численное моделирование двухфазных систем конвекции–реакции–диффузии представляет собой нетривиальную задачу. Во-первых, положение свободной границы должно пересчитываться на каждом временном шаге, что исключает использование фиксированной пространственной сетки. Во-вторых, нелинейные реакционные члены, например логистический член $w(a - bw)$, в рамках стандартных численных схем могут приводить к потере неотрицательности решения, возникновению не физических осцилляций и даже к численной неустойчивости [14]. Наконец, несмотря на то что каждая фаза описывается собственным уравнением в частных производных, они связаны между собой нелинейными условиями на интерфейсе, что требует согласованного и глобально корректного численного подхода.

В связи с этим в последние годы значительное внимание уделяется структуроохраняющим, а в частности, сохраняющим неотрицательность численным методам [15], [16], [17], [18], [19]. Цель таких подходов заключается не только в аппроксимации точного решения, но и в строгом соблюдении фундаментальных физических

ограничений, включая неотрицательность концентраций, естественные верхние оценки плотностей популяций и корректную асимптотику при выходе системы на стационарные режимы.

Получение точных аналитических решений для систем подобного типа, как правило, невозможно, поскольку уже наличие подвижной границы существенно усложняет задачу. Вместе с тем корректное описание движения интерфейса является принципиально важным, поскольку без него любая модель быстро теряет физическую достоверность.

Исходя из этого, в настоящей работе используется стратегия отслеживания фронта, в рамках которой рассматриваются три численных подхода: неявная противоточная схема, схема Кранка–Николсона и новая явная схема, предлагаемая в статье. Последняя специально сконструирована для сохранения неотрицательности решения и структурных свойств исходной модели. Основная цель работы состоит не только в повышении вычислительной эффективности, но и в разработке численных схем, которые остаются физически корректными, устойчивыми и согласованными с фундаментальными свойствами непрерывной задачи.

2. Априорные оценки

В этом разделе устанавливаются априорные оценки в гёлдеровых нормах, необходимые для доказательства глобальной разрешимости рассматриваемой задачи. Ключевую роль в дальнейшем анализе играет принцип максимума для параболических уравнений (см., например, [19]).

Одной из основных трудностей при построении нелокальной теории нелинейных задач является получение подходящих оценок для первых производных решения по пространственной переменной. Для преодоления этой сложности в литературе предложен ряд различных подходов.

В настоящей работе мы используем методику, изложенную в [6], [5], [20], для получения необходимых *a priori* оценок и следуем обозначениям и соглашениям, принятым в [21], [22].

Лемма 2.1. Пусть тройка $(s(t), u(x, t), v(x, t))$ является классическим решением системы (1.1)–(1.5). Определим положительные константы N_1 и N_2 по формулам $N_1 = \max \left\{ \sup_{-\ell \leq x \leq 0} \left(\frac{u_0(x)}{-x} \right), \frac{a_1^2}{b_1 c_1} \right\}$, $N_2 = \max \left\{ \sup_{0 \leq x \leq \ell} \left(\frac{v_0(x)}{x} \right), \frac{a_2^2}{b_2 c_2} \right\}$. Если начальные условия удовлетворяют ограничениям $0 \leq u_0(x) \leq \frac{a_1}{b_1}$, $0 \leq v_0(x) \leq \frac{a_2}{b_2}$, то существуют положительные константы $M_1 = \frac{a_1}{b_1}$, $M_2 = \frac{a_2}{b_2}$ и $M_3 = \alpha N_1 + \beta N_2$, не зависящие от T , такие что справедливы оценки

$$0 < u(x, t) \leq M_1 \quad \text{при } (x, t) \in D_1, \quad 0 < v(x, t) \leq M_2 \quad \text{при } (x, t) \in D_2, \quad 0 < \dot{s}(t) \leq M_3, \quad 0 \leq t \leq T.$$

Доказательство. Начнём с применения параболического принципа максимума к уравнениям (1.1)–(1.2). Реакционные члены $f_1(u) = u(a_1 - b_1 u)$ и $f_2(v) = v(a_2 - b_2 v)$ удовлетворяют условиям $f_i(0) = 0$, причём каждая функция f_i липшицева. Поскольку $u_0(x), v_0(x) \geq 0$, а также выполнены граничные условия $u(s(t), t) = v(s(t), t) = 0$, $u(-\ell, t) = \varphi_1(t) \geq 0$, $v(\ell, t) = \varphi_2(t) \geq 0$, из принципа максимума (см., например, [19, Theorem 2]) следует, что

$$u(x, t) \geq 0 \quad \text{в } D_1, \quad v(x, t) \geq 0 \quad \text{в } D_2.$$

Если дополнительно $u_0(0) = v_0(0) = 0$ и $u_0, v_0 \not\equiv 0$, то по сильному принципу максимума получаем

$$u(x, t) > 0 \quad \text{в } D_1, \quad v(x, t) > 0 \quad \text{в } D_2, \quad t > 0.$$

Для получения верхних оценок введём вспомогательную функцию $\omega(x, t) = \begin{cases} u(x, t), & (x, t) \in D_1, \\ v(x, t), & (x, t) \in D_2, \end{cases}$ для которой реакционный член имеет вид $f(x, t, \omega) = \omega(a_i - b_i \omega)$ ($i = 1, 2$). Поскольку $\underline{\omega} = 0$ и $\bar{\omega} = \frac{a_i}{b_i}$ являются

соответственно под- и надрешением, то из принципа максимума следует

$$0 < u(x, t) \leq \frac{a_1}{b_1} = M_1, \quad (x, t) \in D_1, \quad 0 < v(x, t) \leq \frac{a_2}{b_2} = M_2, \quad (x, t) \in D_2.$$

Далее, для оценки градиентов вблизи свободной границы рассмотрим функцию

$$U(x, t) = N_1(s(t) - x) - u(x, t),$$

где $N_1 > 0$ – константа, подлежащая выбору. Тогда U удовлетворяет

$$\begin{cases} U_t - U_{xx} - c_1 U_x \geq c_1 N_1 - \frac{a_1^2}{b_1} \geq 0, \\ U(x, 0) = N_1(-x) - u_0(x) \geq 0, \\ U(-\ell, t) = N_1(s(t) + \ell) - \varphi_1(t) \geq 0, \\ U(s(t), t) = 0. \end{cases}$$

Следовательно, по принципу максимума $U(x, t) \geq 0$ в D_1 , откуда $u(x, t) \leq N_1(s(t) - x)$, $-\ell \leq x \leq s(t)$. Переходя к левой производной при $x = s(t)$, получаем $-N_1 \leq u_x(s(t), t) < 0$.

Аналогичные рассуждения для второй фазы дают $0 < v_x(s(t), t) \leq N_2$.

Наконец, из условия на свободной границе (1.5) следует

$$0 < \dot{s}(t) \leq \alpha N_1 + \beta N_2 = M_3,$$

что завершает доказательство. \square

Для получения верхних оценок для u_x , v_x и гёльдеровских норм $|u|_Q^{(2+\gamma)}$ и $|v|_Q^{(2+\gamma)}$ предварительно сведём подвижные области к фиксированной. Следуя [6], [19], введём замену переменных

$$\text{для } D_1 : \quad \tau = t, \quad y = \frac{x + \ell}{\ell + s(t)}, \quad \text{для } D_2 : \quad \tau = t, \quad y = \frac{x - \ell}{\ell - s(t)}.$$

Для левой фазы отображение $\tau = t$, $y = \frac{x + \ell}{\ell + s(t)}$ переводит движущуюся область $(-\ell, s(t))$ в фиксированный интервал $(0, 1)$. В результате обе области переходят в фиксированный цилиндр $Q = \{(y, \tau) : 0 < y < 1, 0 < \tau < T\}$.

Полагая $U(y, \tau) = u(x, t)$, из формулы цепочки получаем

$$u_t = U_\tau - \frac{y s'(t)}{\ell + s(t)} U_y, \quad u_x = \frac{1}{\ell + s(t)} U_y, \quad u_{xx} = \frac{1}{(\ell + s(t))^2} U_{yy}.$$

Определим новые неизвестные $U(y, \tau) = u(x, t)$ и $V(y, \tau) = v(x, t)$. Подставляя эти выражения в уравнения (1.1), (1.2) и приводя подобные, получаем квазилинейные параболические задачи вида

$$\begin{cases} U_\tau = A_1(\tau) U_{yy} + F_1(U, U_y), & (y, \tau) \in Q, \\ U(y, 0) = U_0(y), & 0 \leq y \leq 1, \\ U(1, \tau) = 0, \quad U(0, \tau) = \varphi_1(\tau), & \end{cases} \quad (2.1)$$

$$\begin{cases} V_\tau = A_2(\tau) V_{yy} + F_2(V, V_y), & (y, \tau) \in Q, \\ V(y, 0) = V_0(y), & 0 \leq y \leq 1, \\ V(1, \tau) = 0, \quad V(0, \tau) = \varphi_2(\tau). & \end{cases} \quad (2.2)$$

Здесь преобразованные начальные данные имеют вид $U_0(y) = u_0(y(\ell + s(t)) - \ell)$, $V_0(y) = v_0(y(\ell - s(t)) + \ell)$, а коэффициенты задаются формулами $A_1(\tau) = \frac{4}{(\ell + s(\tau))^2}$, $A_2(\tau) = \frac{4}{(\ell - s(\tau))^2}$, $F_1(U, U_y) = \left[\frac{2c_1(\ell + s(\tau)) - 2s(\tau)(x + \ell)}{(\ell + s(\tau))^2} \right] U_y + U(a_1 - b_1 U)$, $F_2(V, V_y) = \left[\frac{-2c_2(\ell - s(\tau)) - 2s(\tau)(x - \ell)}{(\ell - s)^2} \right] V_y + V(a_2 - b_2 V)$.

По лемме 2.1 имеем $0 < u \leq M_1$, $0 < v \leq M_2$, $0 < \dot{s}(t) \leq M_3$. Кроме того, так как $s(t) \in [0, s_{\max})$ при $s_{\max} < \ell$, величины $\ell \pm s(t)$ строго положительны. Следовательно, коэффициенты A_i и F_i равномерно ограничены в области Q . Для любого $\delta \in (0, 1)$ обозначим внутреннюю подобласть $Q_\delta = \{(y, \tau) : \delta \leq y \leq 1 - \delta, \delta \leq \tau \leq T\}$.

Теорема 2.1. *Пусть $U(y, \tau)$ является классическим решением задачи (2.1). Тогда существует константа $M_4 = M_4(M_1, \delta) > 0$, не зависящая от T , такая что*

$$|U_y(y, \tau)| \leq M_4, \quad (y, \tau) \in Q_\delta.$$

Если, кроме того, $U|_{\partial_p Q} = 0$ на параболической границе $\partial_p Q = \{\tau = 0\} \cup \{y = 0\} \cup \{y = 1\}$, то оценка справедлива во всей области Q :

$$|U_y(y, \tau)| \leq M_4(M_1, A_{10}), \quad (y, \tau) \in Q,$$

где $A_{10} = \min_Q \{A_1\} > 0$.

Доказательство. Поскольку функция $U(y, \tau)$ ограничена константой M_1 , а коэффициенты A_1 и F_1 равномерно ограничены в области Q , из внутренней оценки градиента для квазилинейных параболических уравнений (см., например, [22, Theorem 2.1]) следует

$$|U_y(y, \tau)| \leq M_4, \quad (y, \tau) \in Q_\delta.$$

Чтобы распространить оценку на границу, введём функцию $W(y, \tau) = U(y, \tau) - U_0(y)$. Тогда W удовлетворяет

$$\begin{cases} W_\tau = A_1 W_{yy} + G_1(W, W_y), \\ W(y, 0) = 0, \quad W(0, \tau) = 0, \quad W(1, \tau) = 0, \end{cases}$$

где $G_1 = F_1(U, U_y) - A_1(U_0)_{yy}$.

Так как $U_0(y) \in C^{2+\gamma}([0, 1])$, то $(U_0)_{yy}$ ограничена, и, следовательно, функция G_1 также ограничена в Q . Применяя глобальную оценку градиента для параболических уравнений ([22, Chapter III, Theorem 4.1]), заключаем, что W ограничена во всей области Q . Аналогичный аргумент применим к функции $V(y, \tau)$. \square

Возвращаясь к исходным переменным, из оценок для U_y и V_y получаем

$$|u_x(x, t)| \leq C_1 M_4, \quad |v_x(x, t)| \leq C_2 M_4,$$

для всех (x, t) из внутренних подобластей D_1^δ и D_2^δ , отделённых от начального момента времени и фиксированных границ $x = \pm\ell$.

Для вывода гёльдеровских оценок более высокого порядка рассмотрим, например, уравнение для v :

$$v_t = v_{xx} + q(v, v_x), \quad q(v, v_x) = v(a_2 - b_2 v) + c_2 v_x.$$

Из леммы 2.1 и теоремы 2.1 следует, что $|v| \leq M_2$ и $|v_x| \leq M_4$. Следовательно, для некоторой константы $R = R(M_2, c_2) > 0$ имеем

$$|q(v, v_x)| \leq R(v^2 + 1).$$

Теорема 2.2. *Пусть $v \in L^2(D_2)$ и его слабые производные удовлетворяют условиям $v_{xx}, v_{tx} \in L^2(D_2)$. Тогда существует константа $M_5 = M_5(M_2, R) > 0$ такая, что*

$$|v|_{D_2^\delta}^{(1+\gamma/2, 1+\gamma)} \leq M_5.$$

Более того, если линеаризованное уравнение

$$\tilde{a}(y, \tau)w_{yy} + \tilde{b}(y, \tau)w_y + \tilde{c}(y, \tau)w - w_\tau = \tilde{f}(y, \tau)$$

имеет гёльдеровски непрерывные коэффициенты, удовлетворяющие

$$|\tilde{a}|_Q^{(\gamma)} + |\tilde{b}|_Q^{(\gamma)} + |\tilde{c}|_Q^{(\gamma)} + |\tilde{f}|_Q^{(\gamma)} < \infty, \quad \tilde{a} \geq a_0 > 0,$$

и если $w = 0$ на параболической границе, то (см. [22, Theorem 5.3])

$$|w|_Q^{(2+\gamma)} \leq C \left(|\tilde{f}|_Q^{(\gamma)} + \max_Q |w| \right) = M_7.$$

Доказательство. Применяя указанную оценку к функциям $U(y, \tau)$ и $V(y, \tau)$, получаем

$$|U|_Q^{(2+\gamma)} \leq M_7, \quad |V|_Q^{(2+\gamma)} \leq M_7.$$

Переходя к исходным переменным, имеем

$$|u|_{D_1}^{(2+\gamma)} \leq CM_7, \quad |v|_{D_2}^{(2+\gamma)} \leq CM_7,$$

где константа C зависит только от ℓ , M_3 и γ , но не зависит от T . Тем самым необходимые априорные оценки для u_x , v_x и гёльдеровских норм $|u|^{(2+\gamma)}$, $|v|^{(2+\gamma)}$ установлены. \square

Регулярность свободной границы $s(t)$ непосредственно следует из условия Стефана

$$s'(t) = -\alpha u_x(s(t), t) + \beta v_x(s(t), t),$$

вместе с априорными оценками градиента, полученными в лемме 2.1 и теореме 2.1. Действительно, производные u_x и v_x равномерно ограничены и гёльдеровски непрерывны вплоть до свободной границы, то есть u_x , $v_x \in C^{\gamma/2, \gamma}(\overline{D}_i)$, $i = 1, 2$. Следовательно, правая часть условия Стефана принадлежит классу $C^{\gamma/2}([0, T])$, откуда $s \in C^{1+\gamma/2}([0, T])$.

Такой уровень регулярности согласуется с классическими результатами для одномерных задач со свободной границей стефановского типа (см., например, [21, 22]) и является достаточным для корректности преобразованных параболических задач.

Замечание 2.1. Для построения и анализа предлагаемой численной схемы более высокая регулярность свободной границы не требуется.

3. Единственность решения

Для установления единственности классического решения задачи (1.1)–(1.5) рассмотрим интегральное представление свободной границы $s(t)$ (см. [19]):

$$\begin{aligned} s(t) = & \beta \int_{s(t)}^{\ell} v(\xi, t) d\xi - \beta \iint_{D_2} v(a_2 - b_2 v) d\xi d\tau + \alpha \int_{-\ell}^{s(t)} u(\xi, t) d\xi - \alpha \int_{-\ell}^0 u_0(\xi) d\xi \\ & + \beta \int_0^{\ell} v_0(\xi) d\xi - \alpha \iint_{D_1} u(a_1 - b_1 u) d\xi d\tau - \beta c_2 \int_0^t v(\ell, \tau) d\tau - \alpha c_1 \int_0^t u(-\ell, \tau) d\tau. \end{aligned} \tag{3.1}$$

Теорема 3.1. Пусть начальные и граничные условия заданы в указанном выше виде и выполнены предположения леммы 2.1. Тогда классическое решение задачи (1.1)–(1.5) является единственным.

Доказательство. Предположим, что существуют два классических решения $(s_1(t), u_1(x, t), v_1(x, t))$ и $(s_2(t), u_2(x, t), v_2(x, t))$. Введём функции $y(t) = \min\{s_1(t), s_2(t)\}$, $h(t) = \max\{s_1(t), s_2(t)\}$.

Поскольку оба решения удовлетворяют тождеству (3.1), вычитая соответствующие равенства, получаем оценку

$$\begin{aligned} |s_1(t) - s_2(t)| &\leq \alpha \int_{-\ell}^{y(t)} |u_1(\xi, t) - u_2(\xi, t)| d\xi + \beta \int_{y(t)}^{\ell} |v_1(\xi, t) - v_2(\xi, t)| d\xi \\ &+ \alpha \int_0^t \int_{-\ell}^{y(\tau)} |u_1(a_1 - b_1 u_1) - u_2(a_1 - b_1 u_2)| d\xi d\tau + \alpha \int_0^t \int_{y(\tau)}^{\ell} |u_i(a_1 - b_1 u_i)| d\xi d\tau \\ &+ \beta \int_0^t \int_{y(\tau)}^{\ell} |v_1(a_2 - b_2 v_1) - v_2(a_2 - b_2 v_2)| d\xi d\tau + \beta \int_0^t \int_{y(\tau)}^{\ell} |v_i(a_2 - b_2 v_i)| d\xi d\tau, \end{aligned} \quad (3.2)$$

где в промежуточной области между $y(t)$ и $h(t)$ полагаем

$$(u_i(x, t), v_i(x, t)) = \begin{cases} (u_1(x, t), v_1(x, t)), & \text{если } s_2(t) < s_1(t), \\ (u_2(x, t), v_2(x, t)), & \text{если } s_2(t) > s_1(t). \end{cases}$$

Далее введём функции разности $U(x, t) = u_1(x, t) - u_2(x, t)$, $V(x, t) = v_1(x, t) - v_2(x, t)$. Они удовлетворяют следующим краевым задачам:

$$\begin{cases} U_t - U_{xx} - c_1 U_x + A_1(x, t) U = 0, & (x, t) \in D_1^*, \\ U(x, 0) = 0, \quad -\ell \leq x \leq 0, \quad U(-\ell, t) = 0, \quad 0 \leq t \leq T, \\ |U(y(t), t)| \leq M_4 \max_{0 \leq \tau \leq t} |s_1(\tau) - s_2(\tau)|, \quad 0 \leq t \leq T, \end{cases} \quad (3.3)$$

$$\begin{cases} V_t - V_{xx} - c_2 V_x + A_2(x, t) V = 0, & (x, t) \in D_2^*, \\ V(x, 0) = 0, \quad 0 \leq x \leq \ell, \quad V(\ell, t) = 0, \quad 0 \leq t \leq T, \\ |V(y(t), t)| \leq M_5 \max_{0 \leq \tau \leq t} |s_1(\tau) - s_2(\tau)|, \quad 0 \leq t \leq T, \end{cases} \quad (3.4)$$

где $A_1(x, t) = a_1 - b_1(u_1 + u_2)$, $A_2(x, t) = a_2 - b_2(v_1 + v_2)$, а константы $M_4 = \max_{D_1} |u_x|$, $M_5 = \max_{D_2} |v_x|$ ограничены в силу леммы 2.1 и теоремы 2.1.

Поскольку указанные выше уравнения линейны и имеют ограниченные коэффициенты, из параболического принципа максимума (см. [19]) следует, что

$$|U(x, t)| \leq N_1 \max_{0 \leq \tau \leq t} |s_1(\tau) - s_2(\tau)|, \quad |V(x, t)| \leq N_2 \max_{0 \leq \tau \leq t} |s_1(\tau) - s_2(\tau)|, \quad (3.5)$$

где $N_1 > 0$ и $N_2 > 0$ зависят только от начальных данных и параметров системы.

Далее оценим слагаемые в (3.2), используя оценку (3.5). В частности, для первого интеграла имеем

$$\int_{-\ell}^{y(t)} |U(\xi, t)| d\xi \leq N_1(\ell + y(t)) \max_{0 \leq \tau \leq t} |s_1(\tau) - s_2(\tau)| \leq 2\ell N_1 \max_{0 \leq \tau \leq t} |s_1(\tau) - s_2(\tau)|.$$

Аналогично, каждое из остальных слагаемых в (3.2) оценивается величиной, пропорциональной $\max_{0 \leq \tau \leq t} |s_1(\tau) - s_2(\tau)|$. В итоге получаем интегральное неравенство

$$|s_1(t) - s_2(t)| \leq N_3 \int_0^t \max_{0 \leq \tau \leq \sigma} |s_1(\tau) - s_2(\tau)| d\sigma,$$

где $N_3 > 0$ не зависит от T .

Применяя лемму Громуолла, заключаем, что $\max_{0 \leq t \leq T} |s_1(t) - s_2(t)| = 0$, откуда $s_1(t) \equiv s_2(t)$.

Подставляя это равенство в (3.3)–(3.4), получаем однородные граничные условия, и, вновь используя принцип максимума, приходим к выводу, что $U \equiv 0$ и $V \equiv 0$.

Следовательно, оба классических решения полностью совпадают, и решение задачи (1.1)–(1.5) является единственным. Доказательство проводится в рамках методики, использованной в [5], [20]. \square

4. Существование решения

Для доказательства существования классического решения задачи (1.1)–(1.5) используем априорные оценки, полученные в предыдущих разделах. Применяя подходящую замену переменных, свободная граница отображается на фиксированную область, что приводит к эквивалентным переформулированным системам (2.1)–(2.2).

Теорема 4.1. *Пусть выполнены априорные оценки, установленные в лемме 2.1 и теореме 2.2. Тогда задача (1.1)–(1.5) допускает классическое решение, удовлетворяющее соотношениям*

$$u \in C^{2+\gamma, 1+\gamma/2}(\overline{D_1}), \quad v \in C^{2+\gamma, 1+\gamma/2}(\overline{D_2}), \quad s \in C^{1+\gamma/2}([0, T]).$$

Доказательство. Доказательство основано на итерационной процедуре. В качестве начального приближения для свободной границы положим $s^{(0)}(t) \equiv 0$. Пусть для некоторого $k \geq 0$ функция $s^{(k)}(t)$ уже построена. Тогда при фиксированной $s^{(k)}(t)$ решаем задачи (2.1)–(2.2) и находим функции $U^{(k+1)}$ и $V^{(k+1)}$, удовлетворяющие граничным условиям, соответствующим $s^{(k)}(t)$. После этого свободная граница обновляется по формуле

$$\dot{s}^{(k+1)}(t) = -\alpha U_y^{(k+1)}(1, t) + \beta V_y^{(k+1)}(-1, t), \quad s^{(k+1)}(0) = 0.$$

Из леммы 2.1 и теоремы 2.2 следует, что последовательности $\{U^{(k)}\}$, $\{V^{(k)}\}$ и $\{s^{(k)}\}$ равномерно ограничены в гёльдеровских нормах. В частности, существуют положительные константы N_i ($i = 4, 5, 6$), не зависящие от номера итерации k и от T , такие что

$$|U^{(k)}|_Q^{(2+\gamma)} \leq N_4, \quad |V^{(k)}|_Q^{(2+\gamma)} \leq N_5, \quad |s^{(k)}|_{[0, T]}^{(1+\gamma/2)} \leq N_6.$$

Здесь константы N_i зависят только от начальных данных и фиксированных параметров задачи $\ell, a_i, b_i, c_i, \alpha, \beta$ и γ , но не зависят от k и T .

В силу теоремы Арцела–Асколи и компактности вложений в гёльдеровских пространствах можно выделить сходящиеся подпоследовательности $\{U^{(k)}\}$, $\{V^{(k)}\}$ и $\{s^{(k)}\}$ такие, что

$$U^{(k)} \rightarrow U, \quad V^{(k)} \rightarrow V, \quad s^{(k)} \rightarrow s$$

равномерно на компактных подмножествах. Переход к пределу в уравнениях и граничных условиях обосновывается стандартными методами функционального анализа (см., например, [22, Chapter V]).

Таким образом, предельная тройка (U, V, s) образует классическое решение преобразованной задачи. Возвращаясь к исходным переменным с помощью обратного преобразования, получаем классическое решение (u, v, s) исходной задачи со свободной границей (1.1)–(1.5).

Наконец, поскольку все априорные оценки являются равномерными по T , решение может быть продолжено пошагово по времени, что обеспечивает глобальное существование для любого $T > 0$. Следовательно, благодаря независимости априорных оценок от T , решение задачи не только локально существует и единственno, но и допускает глобальное продолжение на произвольные промежутки времени.

Тем самым установлено, что система со свободной границей (1.1)–(1.5) обладает глобальным классическим решением. Полученный результат служит строгим математическим обоснованием для численных экспериментов, представленных ниже, поскольку физическая корректность численных результатов может быть гарантирована лишь при наличии корректно поставленной задачи, обладающей существующим и единственным решением. \square

5. Численные методы

Двухфазная система адвекции–реакции–диффузии (1.1)–(1.5) является нелинейной и содержит подвижную свободную границу стефановского типа. В связи с этим при построении численных схем необходимо обеспечить устойчивость, согласованность аппроксимации и сохранение ключевых качественных свойств непрерывной задачи, прежде всего неотрицательности решения.

Пусть пространственный интервал $[-\ell, \ell]$ аппроксимируется равномерной сеткой с шагом $h = \frac{2\ell}{M}$, а временной интервал $[0, T]$ разбивается на шаги длины $k = \frac{T}{N}$. Узлы сетки определяются как $x_i = -\ell + ih$, где $i = 0, 1, \dots, M$; $t^n = nk$, где $n = 0, 1, \dots, N$. Численные приближения обозначим следующим образом:

$$u_i^n \approx u(t^n, x_i), \quad x_i < s^n, \quad v_i^n \approx v(t^n, x_i), \quad x_i > s^n, \quad s^n \approx s(t^n),$$

где $x_{i_s} \leq s^n < x_{i_s+1}$.

5.1. Явная структуроохраняющая схема

Для левой фазы ($x_i < s^n$) вводится явная конечно-разностная схема

$$u_i^{n+1} = \frac{u_i^n + k \left(\frac{u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n}{h^2} + c_1 \frac{u_i^n - u_{i-1}^n}{h} + a_1 u_i^n \right)}{1 + kb_1 u_i^n}, \quad i = 1, \dots, i_s - 1. \quad (5.1)$$

Для правой фазы ($x_i > s^n$) схема имеет вид

$$v_i^{n+1} = \frac{v_i^n + k \left(\frac{v_{i+1}^n - 2v_i^n + v_{i-1}^n}{h^2} + c_2 \frac{v_{i+1}^n - v_i^n}{h} + a_2 v_i^n \right)}{1 + kb_2 v_i^n}, \quad i = i_s + 2, \dots, M - 1. \quad (5.2)$$

Границные и интерфейсные условия задаются следующим образом $u_0^{n+1} = \varphi_1(t^{n+1})$, $v_M^{n+1} = \varphi_2(t^{n+1})$, $u_{i_s}^{n+1} = v_{i_s+1}^{n+1} = 0$.

Положение свободной границы обновляется с использованием дискретного условия Стефана

$$s^{n+1} = s^n + k(-\alpha u_x(s^n, t^n) + \beta v_x(s^n, t^n)), \quad (5.3)$$

где односторонние пространственные производные аппроксимируются второго порядка точности с помощью лагранжевой экстраполяции.

5.2. Условие устойчивости типа CFL

Поскольку схемы (5.1)–(5.2) являются явными, для обеспечения устойчивости и монотонности требуется выполнение условия типа CFL на шаг по времени. Предполагается, что

$$k \leq \frac{h^2}{2 + |c_i| h}, \quad i = 1, 2. \quad (5.4)$$

Во всех численных экспериментах используется соотношение $k = O(h^2)$, которое удовлетворяет условию (5.4).

Кратко обоснуем сохранение неотрицательности численного решения. Пусть

$$u_i^n \geq 0, \quad v_i^n \geq 0 \quad \text{для всех } i, \quad \varphi_1(t) \geq 0, \quad \varphi_2(t) \geq 0.$$

Из формулы (5.1) при выполнении условия (5.4) следует, что все коэффициенты в числителе являются неотрицательными, а знаменатель удовлетворяет неравенству $1 + kb_1 u_i^n > 0$. Следовательно, $u_i^{n+1} \geq 0$. Аналогичные рассуждения применимы к схеме (5.2), откуда $v_i^{n+1} \geq 0$.

По индукции по временным слоям n получаем, что численное решение остаётся неотрицательным для всех n . Таким образом, предложенная схема является сохраняющей неотрицательность и согласуется с принципом максимума для непрерывной задачи.

6. Предлагаемая численная схема

Классические численные методы, такие как противоточная схема и схема Кранка–Николсона, при применении к нелинейным реакционным системам со свободной границей нередко сталкиваются с серьёзными трудностями. В частности, в подобных задачах они могут приводить к не физическим результатам, включая появление отрицательных концентраций или паразитных осцилляций, что существенно снижает достоверность вычисленного решения. Данная проблема приобретает особенно критический характер в биологических и биомедицинских моделях, где неотрицательность решений имеет прямой физический смысл. В связи с этим разработка структуроохраняющих, а именно сохраняющих неотрицательность, численных схем является принципиально важной.

В этом разделе предлагается новая явная структуроохраняющая численная схема для двухфазной системы адвекции–реакции–диффузии с подвижной границей, навеянная подходом, предложенным Ченом, Шарпантье и Кожухаровым [23]. Предлагаемая схема естественным образом сохраняет фундаментальные физические свойства модели $0 \leq u \leq \frac{a_1}{b_1}$ и $0 \leq v \leq \frac{a_2}{b_2}$, гарантуя неотрицательность и ограниченность решения на всех временных шагах. Кроме того, схема корректно аппроксимирует стационарные состояния и, благодаря своей явной форме, обладает высокой вычислительной эффективностью.

Ключевая идея состоит в перераспределении части нелинейного реакционного члена в знаменатель схемы, что обеспечивает сохранение неотрицательности даже в явной постановке. Это позволяет обрабатывать диффузионные и адвективные члены явным образом, в то время как нелинейный реакционный член учитывается в полурациональной форме: его линейная часть включается аддитивно, а нелинейная часть переносится в знаменатель. Такой баланс сохраняет физическую структуру исходных уравнений без потери вычислительной простоты.

Для левой области ($x_i < s^{n+1}$) предлагаемая схема имеет вид

$$u_i^{n+1} = \frac{u_i^n + k \left[\frac{u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n}{h^2} + c_1 \frac{u_i^n - u_{i-1}^n}{h} + a_1 u_i^n \right]}{1 + kb_1 u_i^n}, \quad i = 1, \dots, i_s - 1. \quad (6.1)$$

Аналогично, для правой области ($x_i > s^{n+1}$) схема записывается в виде

$$v_i^{n+1} = \frac{v_i^n + k \left[\frac{v_{i+1}^n - 2v_i^n + v_{i-1}^n}{h^2} + c_2 \frac{v_{i+1}^n - v_i^n}{h} + a_2 v_i^n \right]}{1 + kb_2 v_i^n}, \quad i = i_s + 2, \dots, M - 1. \quad (6.2)$$

Границные условия задаются следующим образом:

$$u_0^{n+1} = \varphi_1(t^{n+1}), \quad v_M^{n+1} = \varphi_2(t^{n+1}), \quad u_{i_s}^{n+1} = v_{i_s+1}^{n+1} = 0. \quad (6.3)$$

Поскольку функции u и v разрывны на свободной границе $x = s^{n+1}$, условия $u_{i_s}^{n+1} = v_{i_s+1}^{n+1} = 0$ вводятся для корректного отражения физического разделения двух фаз. Положение свободной границы обновляется в соответствии с общим условием Стефана, заданным формулой (5.3).

Следующая теорема устанавливает согласованность предлагаемой схемы с непрерывной дифференциальной моделью.

Теорема 6.1. Пусть $u(x, t)$ является достаточно гладким решением уравнения (1.1), причём $u \in C^{2,1}$. Тогда численная схема (6.1) имеет первый порядок точности по времени и второй порядок точности по пространству. В частности, при $k = \mathcal{O}(h^2)$ локальная погрешность аппроксимации удовлетворяет оценке

$$u_t = u_{xx} + c_1 u_x + a_1 u - b_1 u^2 + \mathcal{O}(k) + \mathcal{O}(h^2).$$

Доказательство. Для анализа погрешности аппроксимации разложим дискретные величины в (6.1) в ряды Тейлора:

$$u_i^{n+1} = u_i^n + ku_t + \frac{k^2}{2}u_{tt} + \dots, \quad u_{i\pm 1}^n = u_i^n \pm hu_x + \frac{h^2}{2}u_{xx} \pm \frac{h^3}{6}u_{xxx} + \dots.$$

Подставляя эти разложения в правую часть (6.1) и раскладывая знаменатель по формуле $1 + kb_1u_i^n = 1 + kb_1u_i^n + \mathcal{O}(k^2)$, в пределе при $k, h \rightarrow 0$ получаем

$$u_t = u_{xx} + c_1u_x + a_1u - b_1u^2 + \mathcal{O}(k) + \mathcal{O}(h^2),$$

что воспроизводит исходное непрерывное уравнение. Тем самым схема обладает первым порядком точности по времени и вторым порядком по пространству, что согласуется с классическими конечно-разностными аппроксимациями параболических уравнений. Влияние граничных членов в данном локальном анализе не учитывается; устойчивость схемы подтверждена численно в последующих экспериментах. \square

В данном разделе также анализируются устойчивость и свойства сохранения неотрицательности предлагаемой явной схемы. В отличие от многих классических методов, требующих жёстких ограничений на шаги по времени и пространству, настоящий метод остаётся устойчивым и физически корректным при всех практически значимых параметрах дискретизации.

Устойчивость проверяется с помощью стандартного анализа фон Неймана, а сохранение неотрицательности доказывается методом математической индукции.

Теорема 6.2. *Предлагаемая численная схема (6.1)–(6.2) является безусловно устойчивой, то есть условие устойчивости выполняется при любых $k \rightarrow 0$ и $h \rightarrow 0$.*

Доказательство. Для исследования устойчивости линеаризуем систему адвекции–реакции–диффузии в окрестности стационарного состояния. Пусть $u_i^n \approx \bar{u} + \epsilon_i^n$, где $\bar{u} = \frac{a_1}{b_1}$ — положение равновесия, а ϵ_i^n — малая возмущающая добавка. Подставляя это представление в (6.1) и отбрасывая нелинейные по ϵ_i^n члены, получаем линеаризованную схему

$$\epsilon_i^{n+1} = \frac{\epsilon_i^n + k \left[\frac{\epsilon_{i+1}^n - 2\epsilon_i^n + \epsilon_{i-1}^n}{h^2} + c_1 \frac{\epsilon_i^n - \epsilon_{i-1}^n}{h} + (a_1 - 2b_1\bar{u})\epsilon_i^n \right]}{1 + kb_1\bar{u}}.$$

Поскольку $a_1 - 2b_1\bar{u} = -a_1 < 0$, реакционный член оказывает демпфирующее воздействие. Аналогичные рассуждения справедливы и для правой фазы при $\bar{v} = \frac{a_2}{b_2}$.

Полагая модальное решение в виде $\epsilon_i^n = \xi^n e^{i\theta ih}$, получаем множитель усиления

$$|\xi| = \left| \frac{1 + k \left[-\frac{4}{h^2} \sin^2(\frac{\theta h}{2}) - i c_1 \frac{\sin(\theta h)}{h} + (a_1 - 2b_1\bar{u}) \right]}{1 + kb_1\bar{u}} \right|.$$

Поскольку модуль числителя не превосходит модуля знаменателя, заключаем, что $|\xi| \leq 1$ при любых $k > 0$ и $h > 0$. Следовательно, схема является безусловно устойчивой и сохраняет численную монотонность даже при относительно больших временных шагах. \square

Теорема 6.3. *Пусть начальные условия удовлетворяют $u_i^0 \geq 0$ и $v_i^0 \geq 0$, а граничные условия таковы, что $\varphi_1(t) \geq 0$ и $\varphi_2(t) \geq 0$. Тогда численные приближения, получаемые по схемам (6.1)–(6.3), остаются неотрицательными для всех пространственных индексов i и всех временных уровнях n , то есть $u_i^n \geq 0, v_i^n \geq 0$.*

Доказательство. Доказательство проводится методом математической индукции. Предположим, что $u_i^n \geq 0$ на некотором временном слое t^n . Тогда из (6.1) следует

$$u_i^{n+1} = \frac{u_i^n + k(\text{неотрицательные слагаемые})}{1 + kb_1 u_i^n}.$$

Поскольку знаменатель удовлетворяет неравенству $1 + kb_1 u_i^n > 0$, а все слагаемые в числителе неотрицательны, заключаем, что $u_i^{n+1} \geq 0$. Аналогичные рассуждения применимы к v_i^{n+1} . Тем самым схема сохраняет неотрицательность решения на каждом временном шаге, что гарантирует физическую корректность численных результатов и предотвращает появление не физических отрицательных концентраций в биологических и химических приложениях. \square

Замечание. Следует отметить, что хотя анализ фон Неймана даёт формальную проверку устойчивости, безусловное сохранение неотрицательности обеспечивает ещё более сильную практическую гарантию рабочности метода. Благодаря своей явной форме и структуроохраняющим свойствам предлагаемая схема обеспечивает одновременно численную устойчивость и физическую согласованность без необходимости введения дополнительных ограничений на параметры дискретизации. Подобные неотрицательностно-сохраняющие явные схемы в настоящее время считаются современным стандартом при численном исследовании нелинейных диффузионно–реакционных систем (см., например, [23]).

7. Численный пример

Пространственная область $[-\ell, \ell]$ дискретизируется равномерной сеткой с шагом $\Delta x = h = \frac{2\ell}{M}$, а временной интервал $[0, T]$ разбивается на N равных частей с шагом по времени $\Delta t = k = \frac{T}{N}$.

В этом разделе приводятся вычислительные эксперименты, демонстрирующие точность, устойчивость и эффективность предлагаемой явной структуроохраняющей схемы. Рассматриваемая тестовая задача описывает двухфазную систему адvection–реакции–диффузии, моделирующую процесс остеоинтеграции вокруг зубного имплантата. В данной постановке левая область соответствует костной ткани, правая область представляет имплантат, а подвижный интерфейс интерпретируется как граница взаимодействия между двумя средами.

Вычислительная область выбирается в виде пространственного интервала $[-\ell, \ell] = [-1, 1]$ и временного интервала $[0, T]$ при $T = 2$.

Физические и модельные параметры задаются следующим образом $a_1 = a_2 = 1$ коэффициенты роста, $b_1 = b_2 = 1$ коэффициенты внутривидовой конкуренции, $c_1 = 0.5$ адvection вправо, $c_2 = -0.3$ адvection влево, $\alpha = \beta = 0.1$ коэффициенты скорости свободной границы, $\varphi_1(t) = \varphi_2(t) = 1$ граничные условия Дирихле.

Начальные условия задаются в виде

$$u_0(x) = \begin{cases} 1 - x^2, & -1 \leq x \leq 0, \\ 0, & x > 0, \end{cases} \quad v_0(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ 1 - x^2, & 0 \leq x \leq 1. \end{cases}$$

Эти начальные профили удовлетворяют как условию согласования на интерфейсе ($u(0, 0) = v(0, 0) = 0$), так и требованию неотрицательности ($u_0, v_0 > 0$ внутри соответствующих областей).

Используется сетка с $M = 200$ пространственными узлами и $N = 400$ шагами по времени, что соответствует $h = 0.01$ и $k = 0.005$. Для сравнения были протестированы три численных метода: (i) неявная противоточная схема (5.1)–(5.2), (ii) схема Кранка–Николсона (5.3)–(5.4), (iii) предлагаемая структуроохраняющая явная схема (6.1)–(6.2).

Предлагаемый метод во всех временных слоях сохранял неотрицательность, то есть $u_i^n \geq 0$ и $v_i^n \geq 0$, что в непрерывной постановке соответствует $u(x, t) \geq 0$ и $v(x, t) \geq 0$.

Для исследования сходимости были выполнены дополнительные расчёты на уточнённых пространственных сетках. В качестве эталонного решения использовалось высокоточное численное решение, полученное при $M = 800$ узлах.

Сходимость оценивалась в норме L^∞ путём сравнения решений, вычисленных на более грубых сетках, с эталонным решением. Полученные результаты подтверждают первый порядок точности по времени и второй порядок точности по пространству, что согласуется с теоретическим анализом. Свободная граница $s(t)$ эволюционировала гладко и монотонно и к конечному моменту времени достигала приблизительно значения $s(2) \approx 0.38$. Неявная противоточная схема также сохраняла неотрицательность, однако была вычислительно более затратной и давала $s(2) \approx 0.37$.

Физическая корректность движения интерфейса проверялась посредством контроля неотрицательности численного решения и монотонности свободной границы. Во всех расчётах выполнялись условия $u(x, t) \geq 0$, $v(x, t) \geq 0$ и $s'(t) > 0$, что согласуется с теоретическими результатами леммы 2.1. Кроме того, численная аппроксимация скорости интерфейса оказалась согласованной с условием Стефана, что указывает на физически осмысленное распространение интерфейса без паразитных осцилляций.

В отличие от этого, схема Кранка–Николсона при $t \gtrsim 1.2$ порождала малые отрицательные колебания с минимальным значением $u_{\min} \approx -0.03$, что нарушает физическую интерпретацию модели. Вследствие этого скорость интерфейса, полученная по данной схеме, демонстрировала немонотонное поведение во времени.

На рисунке 1 показана динамика свободной границы $s(t)$ для всех трёх схем. Только предложенный структуроохраняющий метод последовательно обеспечивал неотрицательность и монотонное продвижение интерфейса на всём промежутке моделирования.

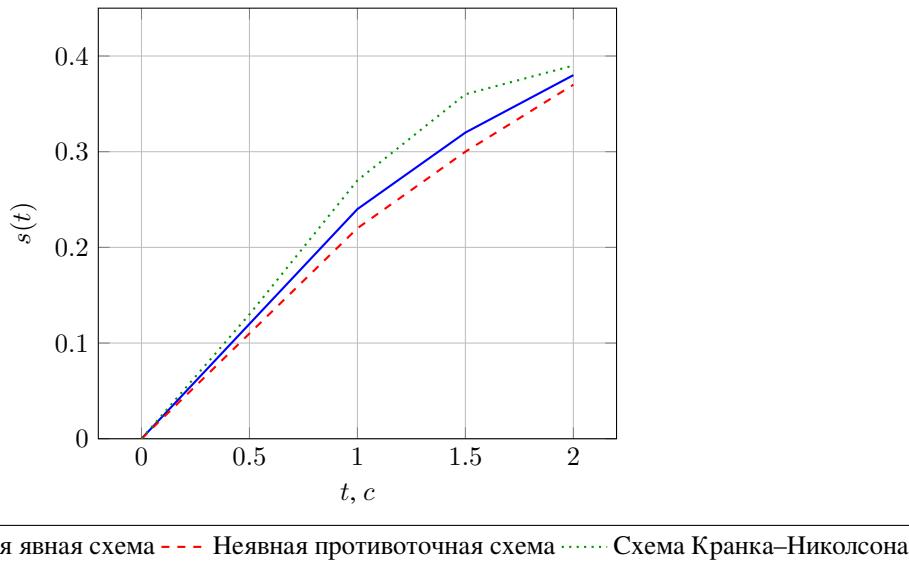


Рис. 1. Эволюция свободной границы $s(t)$ для различных численных схем.

Полученные результаты полностью согласуются с физической интерпретацией процесса: интерфейс всегда движется в сторону области имплантата, что соответствует непрерывному росту ткани ($\dot{s}(t) > 0$).

Предлагаемая явная схема демонстрирует высокую вычислительную эффективность и отличную устойчивость, сохраняя при этом физическую и биологическую согласованность решения.

Для оценки точности предлагаемой схемы использовалось эталонное решение, полученное при $M = 800$ узлах. Сравнение вычислительной стоимости и точности различных методов приведено в таблице 1.

Замечание 7.1. Предлагаемая схема обладает наименьшим временем вычислений благодаря полностью явной структуре. В отличие от неё, как неявная противоточная схема, так и метод Кранка–Николсона требуют

Таблица 1. Сравнение численных схем по вычислительным затратам и точности.

Схема	Время расчёта (с)	Средняя ошибка (L^∞)
Предлагаемая явная	1.2	2.1×10^{-3}
Неявная противоточная	8.7	1.8×10^{-3}
Кранк–Николсон	6.5	1.5×10^{-3}

на каждом шаге по времени решения нелинейной системы (как правило, с использованием итераций Ньютона), что существенно увеличивает вычислительные затраты.

Дополнительные вычислительные эксперименты подтверждают робастность предлагаемой схемы при различных наборах параметров. При увеличении интенсивности адвекции ($c_1 = 2$, $c_2 = -1.5$) противоточная схема оставалась условно устойчивой, тогда как схема Кранка–Николсона порождала сильные осцилляции и в итоге теряла физическую корректность. Предлагаемый структуроохраняющий метод, напротив, сохранял устойчивость и точность при всех рассмотренных настройках.

Аналогично, при усилении нелинейности реакционного члена ($b_1 = b_2 = 5$) только предлагаемый метод корректно сходился к равновесному значению ($u \rightarrow 0.2$), тогда как другие схемы демонстрировали паразитные переразбросы.

На рисунке 2 показана эволюция профиля $u(x, t)$. Предлагаемая схема сохраняет логистическую верхнюю оценку ($u \leq 1$), обеспечивает гладкость вблизи подвижного интерфейса $x = s(t)$ и не порождает искусственных осцилляций. В то же время метод Кранка–Николсона после $t \approx 1.2$ давал нефизические отрицательные значения ($u_{\min} \approx -0.03$), нарушая ограничение неотрицательности, тогда как противоточная схема, оставаясь устойчивой, приводила к более медленному продвижению фронта и заметной диффузионной сглаженности профиля.

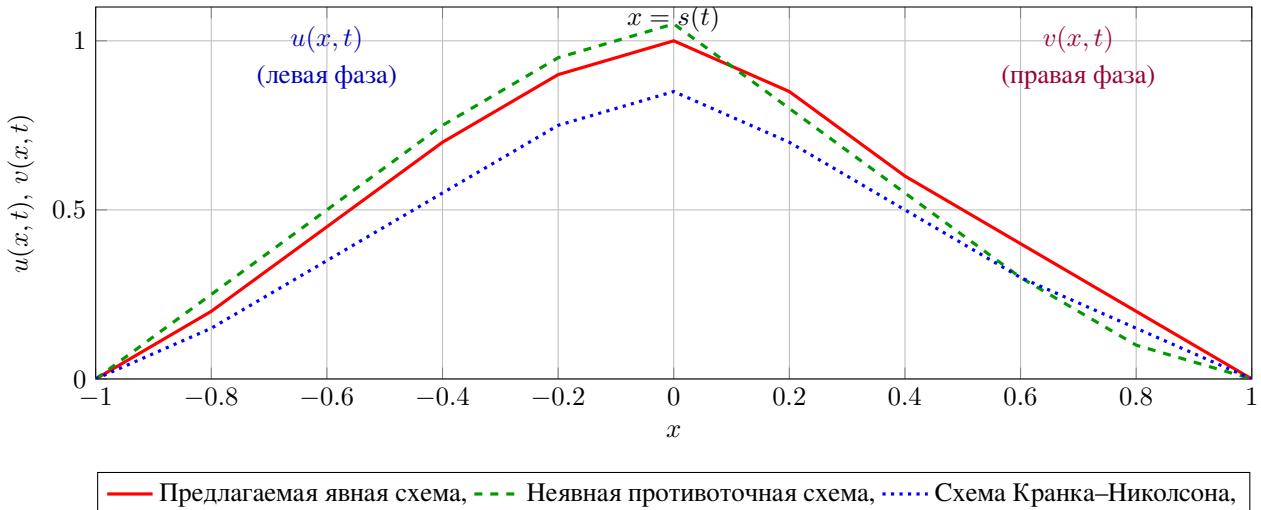
Сравнение профилей u и v , полученных с использованием трёх численных схем

Рис. 2. Сравнение профилей u и v , полученных различными численными схемами. Предлагаемая явная схема (красная) сохраняет гладкость и неотрицательность вблизи подвижного интерфейса $x = s(t)$, тогда как метод Кранка–Николсона (зелёный) демонстрирует осцилляции, а противоточная схема (синяя) обладает большей диффузионностью.

Численные эксперименты наглядно показывают, что предлагаемая структуроохраняющая схема безусловно сохраняет неотрицательность, обеспечивает физически реалистичные результаты и остаётся вычислительно эффективной благодаря явной форме. Даже при сильной адвекции ($c_1 = 2$, $c_2 = -1.5$) или при усиленной

нелинейности реакционного члена метод не демонстрирует neither физических осцилляций nor численной неустойчивости.

В противоположность этому, схема Кранка–Николсона порождает выраженные осцилляции с $|u| > 1.2$, нарушая физические ограничения, тогда как противоточная схема, хотя и остаётся устойчивой, заметно занижает динамику интерфейса. Эти результаты подтверждают, что предложенный подход является робастным и эффективным численным инструментом для моделирования реалистичных биологических и физических процессов, включая остеоинтеграцию вблизи зубных имплантатов, экологическую инвазию и явления фазовых переходов.

8. Заключение

В данной работе разработаны математически строгие и вычислительно эффективные численные методы для двухфазной системы адвекции–реакции–диффузии со свободной границей. На основе априорных оценок доказаны ограниченность и неотрицательность решения, а также получены верхние и нижние оценки скорости движения подвижного интерфейса. Эти результаты послужили надёжной теоретической основой для доказательства существования и единственности классического решения рассматриваемой задачи.

В последующем анализе были подробно исследованы три численных подхода. Хотя классические неявная противоточная схема и схема Кранка–Николсона обладают определёнными преимуществами с точки зрения точности и устойчивости, при применении к нелинейным реакционным системам со свободной границей они выявляют существенные недостатки, такие как потеря неотрицательности, высокая вычислительная стоимость и появление нефизических осцилляций.

Для устранения этих ограничений была предложена новая структуроохраняющая явная схема. Она безусловно сохраняет неотрицательность, корректно сходится к равновесным состояниям и остаётся устойчивой даже при наличии сильной адвекции и выраженных нелинейных реакционных эффектов. Благодаря явной форме схема обладает высокой вычислительной эффективностью. Численные эксперименты подтвердили робастность и надёжность предлагаемого метода, продемонстрировав, что он воспроизводит физически и биологически осмысленные результаты. В частности, схема успешно применена для моделирования процессов остеоинтеграции вокруг зубных имплантатов, фронтов экологической инвазии и динамики фазовых переходов.

В дальнейшем планируется распространить предложенный подход на многомерные задачи, учесть пространственно неоднородные коэффициенты и стохастические возмущения, а также реализовать методы адаптивного уточнения сетки. Кроме того, разработанная методология может быть эффективно адаптирована к другим нелинейным системам, таким как модели Брюсселятора и ФитцХью–Нагумо.

В целом, проведённое исследование подчёркивает ключевую роль структуроохраняющих подходов при численном решении задач со свободной границей, описываемых нелинейными параболическими системами. Предложенный метод представляет собой надёжный и эффективный вычислительный инструмент, пригодный для широкого круга современных научных и прикладных задач.

Благодарность

Авторы выражают искреннюю благодарность Дж. О. Тахирову за постановку задачи и ценные рекомендации на всех этапах исследования. Его содержательные советы, профессиональная поддержка и постоянное внимание сыграли ключевую роль в преодолении возникших трудностей и успешном завершении данной работы.

Список литературы

- [1] Du, Y. and Lin, Z.G.: *Spreading-vanishing dichotomy in the diffusive logistic model with a free boundary*. SIAM J. Math. Anal., **42**, 377–405 (2010).
- [2] Elmurodov, A. N. and Sotvoldiyev, A. I. : *A diffusive Leslie–Gower type Predator-Prey Model with two different free boundaries*. Lobachevskii J.Math. **44**, 4254–4270 (2023).
- [3] Friedman, A. : *Free boundary problems in biology*. Philos. Trans. A. Math. Phys. Eng. Sci. Sep 13; 373(2050):20140368. (2015). <https://doi:10.1098/rsta.2014.0368>.
- [4] Rasulov, M. S. and Elmurodov, A. N.: *A free boundary problem for a Predator-Prey System*. Lobachevskii J.Math. **44**, 2898–2909 (2023).
- [5] Takhirov, J. O.: *A free boundary problem for a reaction-diffusion equation appearing in biology*. Indian J. Pure Appl. Math., **50**(1): 95-112, March (2019).
- [6] Elmurodov, A. N. : *Two-phase problem with a free boundary for systems of parabolic equations with a nonlinear term of convection*. Vestnik KRAUNC. Fiziko-Matematicheskie Nauki, **36**(3), 110–122 (2021).
- [7] Takhirov, J. O. and Elmurodov, A. N. : *About mathematical model with a free boundary of water basins pollutions*. Uzbek Math. J. **64** (4), 149–160 (2020). <https://DOI:10.29229/uzmj.2020-4-16>
- [8] Tyson, J. J., Chen, C. K. and Novak, B.: *Sniffers, buzzers, toggles and blinkers: dynamics of regulatory and signaling pathways in the cell*. Curr. Opin. Cell Biol. **15** (2), 221-231 (2003). [https://doi.org/10.1016/S0955-0674\(03\)00017-6](https://doi.org/10.1016/S0955-0674(03)00017-6)
- [9] Byrne, H. M., Preziosi, L. : *Modelling solid tumour growth using the theory of mixtures*. Math. Med. Biol. **20**(4):341-66 (2003). <https://DOI:10.1093/imammb/20.4.341>
- [10] Wu, Z. and Zhao, J.: *Two-phase free boundary problems for reaction-diffusion systems*. J. Differ. Equ., **272**, 1–35 (2021).
- [11] Shahid, N., Ahmedet, N. and Baleanu, D.: *Novel numerical analysis for nonlinear advection–reaction–diffusion systems*. Comp. Math. Appl. **18**(1):112-125 (2020). <https://DOI:10.1515/phys-2020-0011>
- [12] Friedman, A., Reitich, F. : *Analysis of a mathematical model for the growth of tumors*. J. Math. Biol. **38**(3):262–84. (1999). <https://doi:10.1007/s002850050149>
- [13] Caffarelli, L. A., Friedman, A. : *Continuity of the temperature in the Stefan problem*. Indiana University Mathematics Journal, **28**(1), 53–70 (1979).
- [14] Mickens, R. E. : *Advances in the Applications of Nonstandard Finite Difference Schemes*, 2005 World Scientific, Singapore, (2005). <https://DOI:10.1142/5884>
- [15] Anguelov, R., Lubuma, J. M.-S. : *Contributions to the mathematics of the nonstandard finite difference method*. Numer. Methods Partial Differential Equations, **17** (5), pp. 518-543 (2001). <https://DOI:10.1002/num.1025>
- [16] Chen-Charpentier, B. M., Kojouharov, H. V. : *Unconditionally positive finite difference scheme for advection–reaction–diffusion equations*. J. Comput. Appl. Math.(2016).
- [17] Friedman, A. *Variational Principles and Free-Boundary Problems*, Wiley-Interscience, New York (1982).
- [18] Cannon, J. R. : *The One-Dimensional Heat Equation*. Addison-Wesley. (1984).
- [19] Elmurodov, A.N.: *The two-phase Stefan problem for parabolic equations*. Uzbek Mathematical Journal, **4**, pp.54-64 (2019). <https://DOI:10.29229/uzmj.2019-4-6>
- [20] Elmurodov, A.N. and Rasulov, M.S.: *On a Uniqueness of Solution for a Reaction-Diffusion Type System with a Free Boundary*. Lobachevskii Journal of Mathematics, **43**, 2099–2106 (2022).
- [21] Kruzhkov, S.N.: *Nonlinear parabolic equations in two independent variables*. Trans. Moscow Math. Soc., **16**, 355–373 (1967).
- [22] Ladyzenskaja, O.A., Solonnikov, V.A. and Ural'ceva, N.N.: *Linear and Quasi-Linear Equations of Parabolic Type*, Nauka, Moscow (1968).
- [23] Chen, G., Charpentier, M., Kojouharov, H. V.: *A positivity-preserving finite difference scheme for a class of nonlinear parabolic equations*. Journal of Computational and Applied Mathematics, **346**, 137–148 (2019).

Structure-preserving scheme for two-phase convection reaction diffusion system

A.Elmurodov and A.Sotvoldiyev

Abstract

In this paper, we introduce a novel structure-preserving explicit numerical scheme for a two-phase convection reaction diffusion system featuring a dynamically evolving interface. A priori estimates in Hölder norms are established for both the solution and the free boundary, which allow us to prove the existence and uniqueness of a classical solution and to analyze its qualitative properties. We also present a comparative study of three numerical approaches: the upwind implicit method, the Crank–Nicolson scheme, and the proposed explicit scheme. Numerical experiments demonstrate the robustness and stability of the new method, even in regimes dominated by strong advection and highly nonlinear reaction terms. The proposed scheme provides physically reliable results and is suitable for modeling interface-driven processes

arising in applications such as osseointegration around dental implants, biological invasion, and sharp-interface phase transition phenomena.

Keywords

free boundary problem, advection, reaction, diffusion, structure-preserving method, stability, numerical simulation.

Affiliations

A.Elmurodov

Address: Tashkent State University of Economics, Dept. of Higher and applied mathematics, Tashkent-Uzbekistan.

e-mail: elmurodov8111@mail.ru

ORCID ID:0009-0006-7485-4385

A.Sotvoldiyev

Address: Tashkent State University of Economics, Dept. of Higher and applied mathematics, Tashkent-Uzbekistan.

e-mail: akmal.sotvoldiyev@mail.ru

ORCID ID:0000-0002-9380-5355