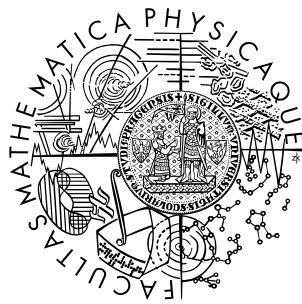


Univerzita Karlova v Praze
Matematicko-fyzikální fakulta

DIPLOMOVÁ PRÁCE



Oto Havle

Počítačová simulace radiobiologického účinku kyslíku

Katedra numerické matematiky

Vedoucí diplomové práce: Doc. RNDr. Jiří Felcman, CSc.

Studijní program: Matematika, Výpočtová matematika

Na tomto místě bych rád poděkoval RNDr. Miloši Lokajčkovi, DrSc. a Ing. Mgr. Jiřímu Barillovi, CSc., za uvedení do problematiky radiobiologie a zapůjčení studijní literatury, dále svému vedoucímu Doc. RNDr. Jiřímu Felemanovi, CSc., za cenné rady a doporučení.

Tato diplomová práce je částí výzkumného projektu MSM 0021620839 financovaného MŠMT a je částečně podporována grantem Grantové Agentury Univerzity Karlovy č. 317/2006/B-MAT/MFF - Matematické modelování radiobiologického účinku kyslíku.

Prohlašuji, že jsem svou diplomovou práci napsal samostatně a výhradně s použitím citovaných pramenů. Souhlasím se zapůjčováním práce.

V Praze dne 12. dubna 2006

Oto Havle

.....

Obsah

1	Úvod	6
2	Odvození základních rovnic	7
2.1	Komentář k aplikacím a literatuře	7
2.2	Související fyzikální, chemické a biologické jevy	8
2.2.1	Faktory ovlivňující biologický účinek	8
2.2.2	Fáze radiobiologického procesu	10
2.2.3	Výklad fyzikální a chemické fáze	10
2.3	Modelování fyzikální a chemické fáze	11
2.3.1	Fenomenologické modely	12
2.3.2	Modely založené na klasické reakční kinetice	12
2.3.3	Stochastické modelování, metody Monte Carlo	13
2.4	Odvození modelu	14
2.4.1	Odvození soustavy rovnic	14
2.4.2	Okrajové a počáteční podmínky	18
2.4.3	Modelování reakcí radikálů s molekulou DNA	19
3	Formulace problému	22
3.1	Slabá formulace	23
3.1.1	Prostory funkcí	23
3.1.2	Definice slabého řešení	26
3.1.3	Jednoznačnost slabého řešení	28
3.2	Přechod k jednorozměrnému problému	30
3.2.1	Odvození jednorozměrné úlohy	30
3.2.2	Prostory funkcí pro jednorozměrnou úlohu	31
3.2.3	Formulace jednorozměrné úlohy	35
3.2.4	Souvislost tří- a jednorozměrné úlohy	35
3.3	Existence řešení jednorozměrné úlohy	45
3.3.1	Zjednodušující předpoklady	45
3.3.2	Modifikovaná soustava	46
3.3.3	Galerkinova metoda	50
3.3.4	Nezápornost	51
3.3.5	Existenční věta	55

3.4	Eliptická regularita	55
4	Numerické řešení	58
4.1	Semidiskretizace v prostoru	59
4.2	Diskrétní prostor V_h	60
4.2.1	Lagrangeovská interpolace	62
4.2.2	Další projekce a jejich vlastnosti	65
4.2.3	Inverzní nerovnost	66
4.3	Globální existence diskrétního řešení, odhad chyby	66
4.3.1	Operátor řešení homogenní úlohy	67
4.3.2	Vyjádření chyby	70
4.3.3	Odhad chyby	72
4.3.4	Volba počáteční podmínky	81
4.4	Další vlastnosti diskretizace	83
5	Počítačová realizace	86
5.1	Implementace	86
5.1.1	Knihovna ODEPACK	86
5.1.2	Soustava obyčejných diferenciálních rovnic	87
5.2	Příklady	88
5.2.1	Radikálové reakce	88
5.2.2	Závislost na koncentraci kyslíku	91
5.3	Zhodnocení modelu	94
6	Závěr	95
A	Nerovnost Gronwallova typu	96
	Seznam tabulek	99
	Seznam obrázků	100
	Literatura	101

Název práce: Počítačová simulace radiobiologického účinku kyslíku

Autor: Oto Havle

Katedra: Katedra numerické matematiky

Vedoucí diplomové práce: Doc. RNDr. Jiří Felcman, CSc.

e-mail vedoucího: felcman@karlin.mff.cuni.cz

Abstrakt: Průnikem částice radioaktivního záření do vnitřního prostředí buňky je zahájen proces, na jehož konci může být buňka zničena v důsledku poškození molekul DNA nesoucích dědičnou informaci. Průběh chemické fáze radiobiologického procesu je ovlivněn přítomností dalších látek v cytoplazmě, zejména rozpuštěného kyslíku. Studium reakcí probíhajících v chemické fázi může napomoci vysvětlení radioprotektivní nebo radiosenzitivní role kyslíku za různých koncentrací. V této diplomové práci jsou difuzní a reakční pochody chemické fáze radiobiologického procesu modelovány pomocí soustavy parabolických semilineárních parciálních diferenciálních rovnic. Model je doplněn o kvantifikaci poškození DNA. Je odvozena klasická a slabá formulace příslušné počáteční úlohy ve třech dimenzích, dokázána jednoznačnost řešení. Za předpokladu sférické symetrie je odvozena ekvivalentní jednorozměrná úloha. Za zjednodušujících předpokladů je dokázána existence řešení Galerkinovou metodou. Jednorozměrná úloha je diskretizována metodou konečných prvků, je odvozen odhad chyby diskretizace. V rámci diplomové práce byl model také realizován na počítači a získány numerické výsledky, které jsou kvalitativně srovnatelné s fyzikální skutečností.

Klíčová slova: radiobiologie, chemická fáze, reakčně-difuzní parciální diferenciální rovnice, sférická symetrie, metoda konečných prvků

Title: Computer Simulation of Radiobiological Effect of Oxygen

Author: Oto Havle

Department: Department of Numerical Mathematics

Supervisor: Doc. RNDr. Jiří Felcman, CSc.

Supervisor's e-mail address: felcman@karlin.mff.cuni.cz

Abstract: Exposing a live cell to ionizing radiation can lead to cell inactivation. Oxygen and other chemical substances soluted in the internal environment of a cell participate in various chemical reactions during the chemical stage of the radiobiological process. The thesis is concerned with modelling diffusion and reaction processes of the chemical stage. A system of semilinear parabolic partial differential equations for concentrations of chemical substances involved is derived in three spatial dimensions, including weak formulation. Assuming spherical symmetry, the problem can be reduced to one dimension. Under further simplifications, existence of solution is proven via Galerkin method. The one-dimensional problem is solved numerically, using finite element discretization. Error estimates and computer implementation are presented.

Keywords: radiobiology, chemical stage, reaction-diffusion equations, spherical symmetry, finite-element discretization

Kapitola 1

Úvod

Je-li buňka vystavena působení ionizujícího záření, může dojít k poškození dědičné informace a následně k odumření buňky. Důkladné pochopení mechanismu tohoto jevu má význam jak při studiu možností ochrany živých organismů před zářením, tak pro radioterapii.

Účinek záření je ovlivněn, mimo jiné, chemickými ději probíhajícími po radiolýze vody v místě doběhu ionizující částice. Matematické modelování této tzv. chemické fáze radiobiologického procesu, je hlavním tématem předkládané diplomové práce. Práce navazuje na článek [1]. Cílem je odvození a počítačová realizace modelu, který přesněji zachycuje difuzi radikálů a umožní uvažovat obecnější systémy chemických reakcí.

V článku [1] jsou difuzní a reakční procesy chemické fáze zjednodušeně popsány soustavou obyčejných diferenciálních rovnic (viz odstavec 2.3.2). V této práci budeme uvažovat soustavu rovnic parciálních. Na rozdíl od [1] se více zaměříme na matematickou stránku modelu. Jakmile formulujeme soustavu parciálních diferenciálních rovnic, vychází všechny naše další úvahy pouze z vlastností této soustavy; snažíme se nesměšovat matematické důkazy s fyzikálním názorem.

Odvození modelu na základě fyzikálních úvah je náplní kapitoly 2. V kapitole 3 upřesníme matematickou formulaci modelu. Odvodíme slabou formulaci a dokážeme jednoznačnost řešení (věta 2, str. 29). Dále se omezíme na sféricky symetrická řešení a redukuje problém do jedné prostorové dimenze, s využitím Sobolevových prostorů s vahou. Za dodatečných předpokladů dokážeme existenci a nezápornost řešení (věta 4, str. 55). V kapitole 4 navrhne numerickou metodu pro řešení uvažované soustavy parciálních diferenciálních rovnic pomocí metody konečných prvků. Dokážeme existenci diskrétního řešení a odvodíme odhad chyby (věta 5, str. 80). Konečně v kapitole 5 popíšeme počítačovou realizaci a uvedeme příklady numerických výpočtů (CD se zdrojovými texty programů přiloženo).

Kapitola 2

Odvození základních rovnic

V části 2.2 uvedeme přehled fyzikálních, chemických a biologických procesů, které se podílejí na vzniku radiobiologického účinku záření. Většina zde popisovaných jevů se ovšem do dále odvozeného modelu promítá pouze nepřímo. V další části 2.3 uvedeme několik možných přístupů k matematickému modelování. Konečně v části 2.4 odvodíme matematický model, jehož rozbor je obsahem této diplomové práce. Části 2.1 až 2.3 uvádějí studovaný problém do širšího kontextu, nejsou pro pochopení textu dalších kapitol nezbytné a čtenář je může přeskocit.

2.1 Komentář k aplikacím a literatuře

Základní aplikační oblastí je radioterapie rakoviny. Radioterapie je založena na ničení buněk nádoru ozařováním. Cílem teoretického úsilí je tedy také sestavení metodiky pro optimalizaci ozařovací procedury.

Z hlediska klinické praxe je pochopitelně nejvýznamnější zkoumání biologického účinku v rozsahu nádorů, tkání nebo celých orgánů. V této práci se ovšem zaměřujeme na fyzikální a zvláště chemickou fázi celého procesu, a proto se omezíme na popis jevů vznikajících nejvýše na úrovni buněk. Nebudeme tedy hovořit o ozařování z více směrů apod. Ani průběhu biologické fáze nebudeme věnovat více než několik poznámek, nutných pro pochopení návaznosti na předchozí fáze a kritérií pro kvantifikaci účinku záření. Zaslíbený a stručný výklad radiobiologického procesu zaměřený na biologické procesy i klinické aplikace lze nalézt ve studii [12]. Vyhneme se také otázkám experimentálního výzkumu buňečného poškození (viz [5] nebo [21]).

Nebudeme se podrobněji zabývat vlastnostmi látek a reakcí, vystupujících v chemické fázi radiobiologického procesu. Tyto údaje se do matematických modelů dostanou pouze jako vstupní data, viz. [14] nebo [7]. Příklady uvedeme v části 5.2.

2.2 Související fyzikální, chemické a biologické jevy

Problematika zasahuje do více oblastí fyziky, chemie a biologie, zahrnuje mnoho přírodních jevů nebo dějů a následně dává vzniknout různým matematickým modelům a výpočetním postupům. Abychom získali nějakou celkovou orientaci a mohli jednotlivé modely postavit do souvislostí, předem rozdělme související fyzikální procesy podle několika kategorií:

1. Podle prostorového rozsahu na problémy makroskopické (rozložení dávky záření v tkáních, biologický účinek na úrovni orgánů a tkání) a mikroskopické (struktura radiační stopy, chemické a biologické procesy uvnitř buněk, interakce záření s biomolekulami).
2. Podle časového rozsahu, od jevů v řádu pod 10^{-15} s (jevy provázející radiační stopu, rozptyl a pohlcování záření) přes pikosekundové (10^{-12} s, vytvoření radikálových clusterů) a nanosekundové (10^{-9} s, chemické reakce, difuze) až po procesy probíhající v řádu dní i delší (postradiační projevy na úrovni orgánů).
3. Podle tradičního rozdělení na jevy fyzikální z oblasti dozimetrie a částicové fyziky (rozptyl záření, vznik sekundárních částic, předání energie záření prostředí a její prostorové uložení), chemické z oblasti fyzikální chemie, radiační chemie, biochemie a reakční kinetiky (počáteční radiační výtěžky, radikálové reakce, problémy difuze a reakce, struktura DNA) a biologické (opravné buněčné procesy, vliv záření na buněčný cyklus, smrt buňky, likvidace nádorů).

V současnosti neexistuje globální model, spojující všechny známé související aspekty. Dílčí modely jsou obvykle nepřilíš kompatibilní, tj. výsledky jednoho nejspíše nelze jednoduše použít jako počáteční podmínky pro jiný model. Byly a jsou odvozovány teorie „fenomenologického“ charakteru, snažící se postihnou širokou část problematiky interpolací experimentálních dat bez úspěšnější snahy o vysvětlení výsledků na základě elementárních fyzikálních principů.

2.2.1 Faktory ovlivňující biologický účinek

Celkový účinek závisí samozřejmě na vlastnostech záření a na vlastnostech ozařovaných buněk. Záření je charakterizováno zejména druhem a energií jednotlivých částic, dále dávkou, tj. energií absorbovanou ozařovaným objektem vztaženou k jednotce hmotnosti, případně dávkovou rychlostí, tj. průměrnou dávkou za jednotku času. Významným parametrem je tzv. lineární přenos energie (LET)¹.

V klinické praxi lze dávku a dávkovou rychlost měnit v jistém rozsahu únosném pro radioterapii celkem libovolně. Ostatní charakteristiky ovšem závisí na použitém zdroji záření. Můžeme rozlišit několik kategorií používaných zářičů

¹Veličina LET (linear energy transfer) je definována jako energie předaná prostředí na jednotku délky dráhy částice. Má smysl jen pro ionizující záření. Pokud se o LET hovoří v souvislosti s elektromagnetickým zářením, myslí se LET sekundárních elektronů. Veličiny jako dávka nebo LET se vztahují k průchodu záření nějakým prostředím. V tomto kontextu budeme dále vždy uvažovat vodu, která tvoří podstatnou část hmotnosti buněk, a zmiňované veličiny považovat za charakteristiky samotného záření.

1. Rentgenové zářiče a zářiče γ .

Elektromagnetické záření (fotony) z radioaktivních zářičů nebo brzdné záření. Vyznačuje nízkou energii částic i nízké hodnoty LET, a není prakticky schopné způsobit přímé poškození DNA. Poškození DNA je způsobeno vzbuzenými chemickými procesy. Již dlouhou dobu se běžně používá pro radioterapii. Při srovnávání různých druhů záření se právě γ -záření bere jako referenční záření.

2. β -záření

Svazky elektronů z lineárních urychlovačů. Hodnoty LET jsou vyšší než u záření γ . I β -záření je v radioterapii běžně používáno.

3. Protony a lehké ionty.

Svazky iontů s protonovými čísly 1 až 6 (uhlík). Mají menší boční rozptyl než záření γ a β , je pozorováno tzv. Braggovo maximum, poškození je soustředěno do malé prostorové oblasti. Výrazně převládá přímý účinek záření na DNA (dokonce může dojít k současnému poškození homologických chromozomů jednou částicí), vlivy sekundárního poškození a kyslíkový efekt ustupují.

V současnosti se zájem výzkumníků zaměřuje na protony a lehké ionty, které se zdají být pro radioterapii vhodnější. Z přechodního přehledu je jasné, že konkrétní průběh zvláště fyzikální fáze se u různých druhů záření podstatně liší. Modely vhodné pro γ -záření obecně nebudou použitelné v případě iontů a naopak.

Vedle fyzikálních vlastností záření výsledek spoluurčují také vlastnosti ozařovaných objektů. Buňka je složitý a navíc živý systém vybavený účinnými samoregulačními a opravnými mechanismy. Její rozhodující vlastnosti nelze popsat stejně jednoduše jako v případě fyzikálního záření. Je třeba vzít v úvahu zvláště tyto faktory:

1. Buňka obsahuje více druhů biomolekul, významných pro život buňky, které mohou být zářením zasaženy. Za rozhodující se ovšem považuje pouze poškození molekul DNA v jádře (chromozomální DNA). Neporušenost DNA je nutnou podmínkou pro správný průběh buněčného cyklu a rozmnožování (dělení) buňky. Buňčné jádro ovšem představuje pouze malou část objemu celé buňky. Tím se pravděpodobnost zásahu snižuje.
2. Vnitřní prostředí buňky (cytoplazma) je vyplněno vodným roztokem mnoha organických sloučenin. Je nutno uvažovat možnost ionizace vody za vzniku reaktivních radikálů, které následně způsobí sekundární poškození DNA chemickou reakcí. Tento jev může být omezen nebo naopak podpořen dalšími rozpuštěnými chemickými látkami (radioprotektiva, radiosenzitiva, kyslík).
3. Buňka disponuje schopností opravit poškození DNA (reparační mechanismy). Jsou možné opravy jednoho vlákna dvojšroubovice DNA pomocí druhého, v případě diploidních buněk také opravy celé molekuly podle homologického chromozomu.

Při radioterapii je navíc třeba rozlišovat mezi nádorovými buňkami a zdravou tkání. Rozdílné vlastnosti nádorových a normálních buněk podporují (rychlejší regenerace zdravých tkání) nebo oslabují (např. nepříznivý kyslíkový efekt) požadovaný výsledek terapie.

2.2.2 Fáze radiobiologického procesu

Sledujeme-li efekty způsobené jednou částicí záření, můžeme podle povahy probíhajících procesů a jejich rozložení v čase² rozdělit celý radiobiologický proces do tří fází.

1. Fáze fyzikální.

Radiobiologický proces začíná ozářením, tedy průchodem ionizujících částic buňkou. Už v této fázi může dojít k poškození dědičné informace skutečnou interakcí záření s molekulou DNA. Pro záření s nízkým LET však záření samotné DNA poškodit nemůže. Vyvolá ovšem ionizaci vody a dalších látek rozpuštěných ve vnitřním prostředí buňky a spustí tak další, chemickou fázi.

2. Fáze chemická.

Ionizací vzniká z vody a látek v ní rozpuštěných shluk (cluster) radikálů. Radikály s původními látkami a spolu navzájem reagují a postupně se rekombinují zpět na výchozí látky. Před rekombinací mohou také reagovat s molekulou DNA a poškodit ji.

3. Fáze biologická.

Molekula DNA je nyní poškozena. Některá poškození může buňka (pomocí reparačních enzymů) opravit, jiná poškození jsou nevratná. Dochází k inaktivaci (zničení) buňky.

2.2.3 Výklad fyzikální a chemické fáze

Záření γ proniká do látkového prostředí a interaguje s atomy látky. Mechanizmů interakce je několik druhů. Dochází k interakci s elektrony atomového obalu a vzniku sekundárních (vyražených) elektronů (Comptonův rozptyl na valenčním elektronu, fotoefekt, tvorba páru elektron-pozitron, excitace s následným uvolněním elektronu - Augerův jev). Může také dojít pouze k vychýlení fotonu bez ztráty energie (Rayleighův rozptyl). K interakci s jádrem při energiích záření používaných v radioterapii nedochází. Sekundární elektrony mohou mít ještě dostatečně vysokou energii, pohybují se prostředím dál a vyraží další elektrony, případně dávají vzniknout i fotonům. Radiační stopa se tak rozšiřuje, vznikají excitované molekuly. Ze zpomalených elektronů se nakonec stanou tzv. solvatované (hydratované) elektrony e_{aq}^- , struktury z elektronu obklopeného několika molekulami vody H_2O , které již jako běžné ionty podléhají difuzi a účastní se chemických reakcí.

²Současně proniká do celého objemu ozařované látky mnoho částic. Při popisu následných jevů se ovšem používá pojem lokálního času [3], kdy první interakci jedné uvažované částice záření přiřadíme čas nula a sledujeme pouze důsledky této interakce.

Představíme-li si dráhu záření a všech sekundárních elektronů, vznikne v důsledku průniku jednoho fotonu do prostředí neostrá, nepravidelně rozvětvená stopa. Největší lokální účinek, vyjádřený veličinou LET, mají elektrony na konci své dráhy (tedy elektrony s určitou nižší energií). Tam vznikají clustery, kulovité shluky excitovaných molekul a solvatovaných elektronů. Ostřejší stopy válcového tvaru jsou charakteristické spíše pro těžší částice (lehké ionty).

Vznikem clusterů končí fyzikální fáze, v lokálním čase asi do 10^{-11} s. Na konci fyzikální fáze je v clusteru dáno nějaké rozložení iontů, excitovaných molekul a solvatovaných elektronů (počáteční výtěžky). Vzhledem k odlišnému způsobu vzniku lze očekávat jiné rozložení e_{aq}^- a ostatních látek vzniklých ionizací. Během fyzikální fáze může dojít k přímému poškození DNA zářením.

Na rozhraní chemické a fyzikální fáze dochází k rozpadu excitovaných molekul a vzniku dalších radikálů a iontů. V chemické fázi (řádově 10^{-11} s až 10^{-5} s) vzniklé látky reagují navzájem, reagují látkami rozpuštěnými v roztoku a rekombinují se zpět na původní látky. Radikály mohou být eliminovány chemickým způsobem, jestliže jsou v roztoku přítomny tzv. vychytavače (scavengers), tj. látky, které reagují s určitými radikály přednostně (reakce s vysokou rychlostní konstantou) za vzniku stabilních produktů.

Cluster se zvětšuje difuzí. Jestliže cluster vznikl v blízkosti molekuly DNA, může dojít k reakci s radikály a poškození DNA. Přerušení jednoho vlákna dvoušroubovice DNA se nazývá jednoduchý zlom³. Přerušení obou vláken v nepříliš vzdálených místech se nazývá dvojný zlom⁴. Za rozhodující charakteristiku konce chemické fáze se považují (v případě γ -záření) právě počty dvojných zlomů, obvykle vztahované na jednu základní stavební jednotku molekuly DNA, nukleotidový pár⁵.

2.3 Modelování fyzikální a chemické fáze

Přístupy k modelování, které lze vysledovat z existující literatury, lze obecně rozdělit do tří kategorií.

1. Fenomenologické modely.

Založeny na výběru rozhodujících jevů globálního charakteru a volbě jejich pravděpodobností, z nichž se počítají hodnoty experimentálně zjištěných ukazatelů. Tyto modely většinou přesahují až do biologické fáze.

2. Modely založené na klasické reakční kinetice.

Difuzní a reakční procesy jsou zachyceny soustavou diferenciálních rovnic. Do této kategorie patří i model odvozený v této práci.

3. Modely založené na metodě Monte Carlo.

Jsou simulovány průlety částic prostředím a reakční a difuzní procesy na úrovni jednotlivých molekul.

³SSB, single strand break

⁴DSB, double strand break

⁵bpp, breaks per base pair

2.3.1 Fenomenologické modely

Tyto modely se snaží postihnout celý radiobiologický proces včetně biologické fáze. Pro popis biologické fáze mechanistické modely patrně neexistují. Mnoho pozornosti se věnuje tzv. křivkám přežití [12].

Fenomenologické popisy vlivu kyslíku na účinek záření používají veličinu OER (oxygen enhancement ratio). První modely byly navrženy v 50. letech 20. století, ještě před doceněním významu molekuly DNA. Tyto modely se v literatuře objevují v rozšířené podobě i dnes [13].

2.3.2 Modely založené na klasické reakční kinetice

Tyto modely se zaměřují na chemickou fázi, reakce radikálů a difuzi. Popisují vývoj chemické stopy, tj. koncentrace radikálů vzniklých ionizací vody a případně rozpuštěných látek po průchodu ionizující částice v okolí její stopy. Obecná rovnice pro koncentrace $c_i = c_i(x, t)$ je (srov. [3], schematicky)

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} = D_i \Delta c_i + \sum_{j,k} a_{ijk} c_j c_k + \sum_j b_{ij} c_j \quad (2.1)$$

kde D_i je difuzní koeficient i -té látky a konstanty a_{ijk} , b_{ij} zahrnují rychlostní konstanty uvažovaných reakcí, kterých se i -tá látka účastní. Difuzně-reakční rovnici (2.1) lze řešit numericky. Je také možné přijmout některé zjednodušující předpoklady a řešení parciálních diferenciálních rovnic tak obejít.

Model Barilly a Lokajička

Popíšeme nyní model chemické fáze, rozvíjený v pracích Barilly a Lokajička [2], [1]. Vynecháme podrobnosti týkající se konkrétních chemických látek, reakcí a problematiku stanovení neznámých parametrů z experimentálních dat.

Model byl vytvořen za účelem interpretace experimentálních dat z [5]. V experimentu je vodný roztok DNA vystaven γ -záření. Nad roztokem je atmosféra ze směsi kyslíku a dusíku nebo směsi kyslíku a oxidu dusného N_2O . Měří se závislost počtu dvojných zlomů na podílu kyslíku ve směsi nad roztokem.

Popis modelu Parametry modelu jsou částečně převzaty z literatury, částečně získané optimalizací, aby se výsledky přiblížily experimentálním křivkám. Jádro modelu je v popisu difuze radikálů a jejich vzájemných chemických reakcí. Počáteční podmínky jsou víceméně parametry, počet dvojných zlomů se počítá na základě zjednodušených pravděpodobnostních úvah.

Základní představa chemické fáze použitá v modelu je následující. Jako důsledek radičních procesů fyzikální fáze vznikl v blízkosti molekuly DNA shluk (cluster) radikálů

OH , H , O , HO_2 a solvovaného elektronu e_{aq} . V důsledku nepravidelných drah sekundárních elektronů lze předpokládat, že tento shluk má sférický tvar. Radikály navzájem reagují a cluster se difuzí zvětšuje.

Neuvažuje se obecná difuzně-reakční parciální diferenciální rovnice (2.1) pro koncentrace. Pomocí předpokladu zachování sférické symetrie a jisté předepsané závislosti objemu clusteru na čase se matematický popis zjednoduší na soustavu obyčejných diferenciálních rovnic pro počet molekul jednotlivých radikálů v clusteru. Soustava se řeší numericky, koncový čas t_m je stanoven jako čas, kdy v clusteru zbývá méně než dvě molekuly radikálů. Pravděpodobnost vzniku jednoduchého zlomu se stanoví z poměru radikálů v koncovém čase [2] nebo z integrálu počtu radikálů přes časový interval (má zachytit možnost setkání různých clusterů s DNA v různých časech) [1]. Příspěvek radikálu k vzniku jednoduchého zlomu je vážen parametrem vyjadřujícím reaktivitu tohoto radikálu s molekulou DNA.

2.3.3 Stochastické modelování, metody Monte Carlo

Tyto přístupy se snaží postihnout zvláště fyzikální fázi. Jsou založeny na existujících modelech a počítačových programech vyvinutých původně pro potřeby jaderného inženýrství (a tedy pro jiné rozsahy energií záření). Monte Carlo se také používá při plánování léčby k výpočtu prostorového rozložení dávky v těle pacienta. Některé modely zahrnují i radikálové reakce a sekundární poškození DNA.

Základní myšlenkou metody Monte Carlo pro modelování interakce záření s látkou je simulace mnoha nezávislých případů průniku částice záření (fotonu, elektronu, pozitronu) do látkového prostředí. Pomocí známých pravděpodobností různých fyzikálních jevů, které průlet částice provázejí (rozptyly, vznik sekundárních částic atd.), známých rozdělení pravděpodobnosti souvisejících veličin (střední volná dráha, energie sekundárních částic atd.) a generátoru pseudonáhodných čísel se v každém jednotlivém počítačovém experimentu postupně sestavuje trajektorie částice a počítají se vybrané fyzikální charakteristiky (velikost energie předané částicí vybranému objemu atd.). Závěrečné výsledky se dostanou zprůměrováním výstupů mnoha simulovaných experimentů [27].

Výhodou simulací typu Monte Carlo je možnost detailně zahrnout skutečný mikroskopický průběh všech známých fyzikálních jevů, které v látce probíhají. Jakýkoliv pokus zachytit všechny jevy při jiném přístupu by se neobešel bez neúměrných teoretických komplikací. Např. v [16] byly metodou Monte Carlo počítány pravděpodobnosti vzniku různých typů poškození vláken DNA, což výrazně kontrastuje se zjednodušujícím přístupem [1]. V [4] autoři do modelu zahrnuli strukturní vlastnosti molekuly DNA, apod.

Nevýhodou je neefektivní výpočet na počítači, nutnost znát mnoho fyzikálních parametrů (účinné průřezy, pravděpodobnosti různých typů interakce záření s látkou, parametry záření atd.).

Z literatury se zdá, že se simulacím typu Monte Carlo dává v poslední době přednost před klasickým přístupem.

2.4 Odvození modelu

Odvodíme nyní model chemické fáze, vycházející z klasické reakční kinetiky. Výsledkem bude popis reakcí a difuzí radikálů pomocí soustavy parciálních diferenciálních rovnic.

Uvažujme situaci, která nastane po ozáření vody, případně vodného roztoku nějakých chemických látek, zářením γ . Soustředíme se na malou oblast (o průměru desítek až stovek nanometrů) prostoru v blízkosti doběhu sekundárního elektronu, kde radiolýzou vody vznikl cluster reaktivních radikálů (H^\bullet , OH^\bullet , HO_2^\bullet , e_{aq} , ...). Do jisté doby po ozáření (řádově desítky až stovky nanosekund) dochází k zániku clusteru radikálů difuzí a rekombinačními reakcemi. Mezitím mohou radikály napadat další látky přítomné v roztoku. Zajímá nás chování radikálů a dalších chemických látek a vývoj clusteru v čase.

Při odvozování není zatím nutné chemické látky a reakce konkretizovat. Označme sledovanou oblast prostoru Ω , sledovaný časový interval $(0, T)$ a

$$\mathcal{S}_1, \dots, \mathcal{S}_L \tag{2.2}$$

sledované chemické látky. Chování chemických látek ve sledované oblasti prostoru popíšeme funkcemi

$$c_i : \Omega \times (0, T) \rightarrow \mathbb{R}.$$

Hodnota funkce $c_i(x, t)$ vyjadřuje koncentraci⁶ látky \mathcal{S}_i v bodě $x \in \Omega$ a časovém okamžiku $t \in (0, T)$.

2.4.1 Odvození soustavy rovnic

Difuze

Uvažujme malý referenční objem $V \subset \Omega$ s hranicí ∂V , nezávislý na čase. Podle 1. Fickova zákona je látkové množství, prošlé jednotkovým průřezem za časovou jednotku, úměrné koncentračnímu gradientu. Pro změnu množství látky \mathcal{S}_i v referenčním objemu V způsobenou difuzí tedy platí

$$\left(\frac{d}{dt} \int_V c_i(x, t) dx \right)_{\text{difuzí}} = D_i \int_{\partial V} \frac{\partial c_i(x, t)}{\partial n} dS.$$

Symbol $\partial/\partial n$ značí derivaci podle vnější normály k hranici ∂V , konstanta D_i je difuzní součinitel látky \mathcal{S}_i .

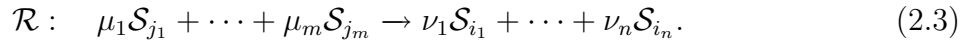
Předpokládáme, že D_i jsou nezáporné konstanty. Pokud látka \mathcal{S}_i difuzi nepodléhá, kládeme $D_i = 0$.

⁶Koncentrace c látky ve směsi je definována jako podíl látkového množství a objemu směsi, jednotka obvykle mol/l. Zde ji chápeme jako objemovou hustotu látkového množství. Viz také poznámku na str. 15.

Reakce

Příspěvek reakce do změny koncentrace množství látky odvodíme aplikací jednoduchých pravidel formální reakční kinetiky na referenční objem V .

Formální reakční kinetika (viz. [26]) studuje reakce za předpokladu, že reagující látky jsou v pevném reakčním objemu (např. nějaké nádobě) rozloženy rovnoměrně a jejich koncentrace jsou v každém zvoleném časovém okamžiku stejné ve všech bodech tohoto objemu. Koncentrace tedy závisí pouze na čase, $c_i(x, t) = c_i(t)$. Okamžitá rychlost obecné reakce



je definována jako časová derivace koncentrace reaktantu nebo produktu (normovaná příslušným stechiometrickým koeficientem)

$$v = -\frac{1}{\mu_k} \cdot \frac{dc_{j_k}}{dt} = \frac{1}{\nu_\ell} \cdot \frac{dc_{i_\ell}}{dt} \quad k = 1, \dots, m, \ell = 1, \dots, n.$$

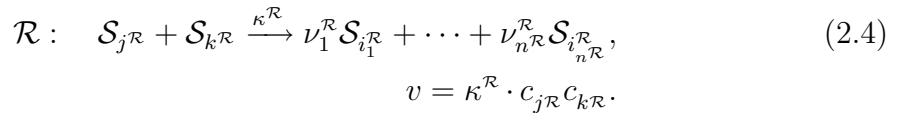
Rychlost v závisí na okamžitých koncentracích reaktantů podle vztahu

$$v = \kappa \cdot c_{j_1}^{\alpha_1} \cdots c_{j_m}^{\alpha_m}.$$

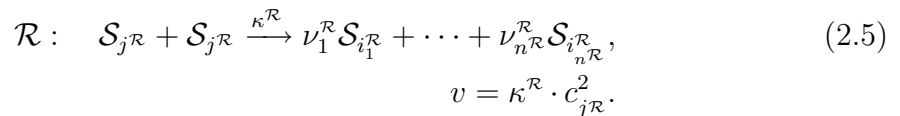
Koeficient $\kappa > 0$ je tzv. rychlostní konstanta reakce, součet exponentů $\sum \alpha_k$ se nazývá řád reakce.⁷

Pro účely studia reakcí radikálů vzniklých radiolýzou vody předpokládáme reakce pouze tří typů (např. soustava chemických reakcí v [7] tento předpoklad splňuje)

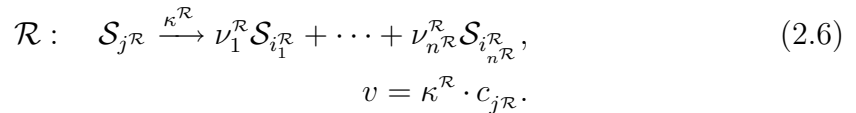
1. bimolekulová reakce dvou různých látek ($j^{\mathcal{R}} \neq k^{\mathcal{R}}$) druhého řádu



2. rekombinační reakce



3. monomolekulová reakce prvního řádu



⁷ Rychlostní konstanta κ i exponenty α_i jsou pro konkrétní reakce určovány experimentálně. Exponenty α_i obecně nemusí být celá čísla. Z toho plynoucí formální obtíže lze vyřešit zavedením bezrozměrných veličin. V této práci se těmito otázkami zabývat nebudeme. O volbě jednotek při numerických výpočtech viz odstavec 5.2.

Abychom se vyhnuli nedorozumnění v pozdějších úvahách, přidáváme již nyní k veličinám jako horní index symbol reakce, k níž se vztahují. Předpokládáme, že žádná látka není zároveň reaktantem i produktem reakce, formálně

$$\begin{aligned} j^{\mathcal{R}}, k^{\mathcal{R}} &\notin \{i_1^{\mathcal{R}}, \dots, i_{n^{\mathcal{R}}}^{\mathcal{R}}\}, & \text{pro reakci } \mathcal{R} \text{ typu (2.4),} \\ j^{\mathcal{R}} &\notin \{i_1^{\mathcal{R}}, \dots, i_{n^{\mathcal{R}}}^{\mathcal{R}}\}, & \text{pro reakci } \mathcal{R} \text{ typu (2.5) nebo (2.6).} \end{aligned}$$

V seznamu produktů se látky neopakují, $i_\ell^{\mathcal{R}} \neq i_{\ell'}^{\mathcal{R}}$ pro $\ell \neq \ell'$. Připouštíme případy, kdy je seznam produktů reakce prázdný ($n^{\mathcal{R}} = 0$). Toto rozšíření umožňuje vynechat ze soustavy látky, které v chemických rovnicích vystupují pouze na straně produktů a neovlivňují rychlost reakcí. Vodu v rovnicích vynecháváme vždy a to i v případě, že je pro průběh reakce z fyzikálního pohledu rozhodující⁸. Reakce totiž probíhají ve vodném roztoku a množství vody řádově převyšuje množství ostatních látek. Vliv reakcí na celkové množství vody je zanedbatelný.

Použijeme-li uvedené vztahy na reakce probíhající v referenčním objemu V , dostaneme příspěvky

$$\left(\frac{d}{dt} \int_V c_i(x, t) dx \right)_{\text{reakcí } \mathcal{R}} = \int_V r_i^{\mathcal{R}}(x, t) dx, \quad i = 1, \dots, L,$$

kde

1. V případě bimolekulové reakce (2.4)

$$r_i^{\mathcal{R}} = \begin{cases} \nu_\ell^{\mathcal{R}} \kappa^{\mathcal{R}} c_{j^{\mathcal{R}}} c_{k^{\mathcal{R}}} & \text{pro } i = i_\ell^{\mathcal{R}}, \ell = 1, \dots, n^{\mathcal{R}}, \\ -\kappa^{\mathcal{R}} c_{j^{\mathcal{R}}} c_{k^{\mathcal{R}}} & \text{pro } i = j^{\mathcal{R}} \text{ nebo } i = k^{\mathcal{R}}, \\ 0 & \text{pro } i \in \{1, \dots, L\} \setminus \{j^{\mathcal{R}}, k^{\mathcal{R}}, i_1^{\mathcal{R}}, \dots, i_{n^{\mathcal{R}}}^{\mathcal{R}}\}. \end{cases} \quad (2.7)$$

2. V případě rekombinační reakce (2.5)

$$r_i^{\mathcal{R}} = \begin{cases} \nu_\ell^{\mathcal{R}} \kappa^{\mathcal{R}} c_{j^{\mathcal{R}}}^2 & \text{pro } i = i_\ell^{\mathcal{R}}, \ell = 1, \dots, n^{\mathcal{R}}, \\ -2\kappa^{\mathcal{R}} c_{j^{\mathcal{R}}}^2 & \text{pro } i = j^{\mathcal{R}}, \\ 0 & \text{pro } i \in \{1, \dots, L\} \setminus \{j^{\mathcal{R}}, i_1^{\mathcal{R}}, \dots, i_{n^{\mathcal{R}}}^{\mathcal{R}}\}. \end{cases} \quad (2.8)$$

3. V případě reakce prvního řádu (2.6)

$$r_i^{\mathcal{R}} = \begin{cases} \nu_\ell^{\mathcal{R}} \kappa^{\mathcal{R}} c_{j^{\mathcal{R}}} & \text{pro } i = i_\ell^{\mathcal{R}}, \ell = 1, \dots, n^{\mathcal{R}}, \\ -\kappa^{\mathcal{R}} c_{j^{\mathcal{R}}} & \text{pro } i = j^{\mathcal{R}}, \\ 0 & \text{pro } i \in \{1, \dots, L\} \setminus \{j^{\mathcal{R}}, i_1^{\mathcal{R}}, \dots, i_{n^{\mathcal{R}}}^{\mathcal{R}}\}. \end{cases} \quad (2.9)$$

⁸To se týká například disociační reakce $HO_2 \rightarrow H_3O^+ + O_2^-$ [7] nebo reakcí hydratovaného elektronu e_{aq}^- , což je elektron obklopený jistým počtem molekul vody.

Je zřejmé, že členy $r_i^{\mathcal{R}}$ lze vyjádřit jako polynomy nejvýše druhého stupně proměnných c_1, \dots, c_L ,

$$r_i^{\mathcal{R}} = \sum_{j,k=1}^L a_{ijk}^{\mathcal{R}} c_j c_k + \sum_{j=1}^L b_{ij}^{\mathcal{R}} c_j, \quad i = 1, \dots, L, \quad (2.10)$$

kde konstanty a_{ijk} , b_{ij} , $i, j, k = 1, \dots, L$ spočteme z multiplikatивních koeficientů v (2.7), (2.8) resp. (2.9).

Označme \mathfrak{R} systém všech uvažovaných reakcí, z nichž každá spadá pod jeden z uvedených tří typů. Příspěvek všech reakcí dostaneme sečtením příspěvků jednotlivých reakcí a můžeme zapsat ve tvaru

$$\left(\frac{d}{dt} \int_V c_i(x, t) dx \right)_{reakcemi} = \int_V \sum_{\mathcal{R} \in \mathfrak{R}} r_i^{\mathcal{R}}(x, t) dx = \int_V \left(\sum_{j,k=1}^L a_{ijk} c_j c_k + \sum_{j=1}^L b_{ij} c_j \right) dx,$$

$$a_{ijk} = \sum_{\mathcal{R} \in \mathfrak{R}} a_{ijk}^{\mathcal{R}}, \quad b_{ij} = \sum_{\mathcal{R} \in \mathfrak{R}} b_{ij}^{\mathcal{R}}, \quad i, j, k = 1, \dots, L.$$

Vlastnosti koeficientů a_{ijk} , b_{ij}

Vlastnosti chemických reakcí se projeví v hodnotách koeficientů. Z (2.7)-(2.9) plyne

$$\begin{aligned} a_{ijk} \leq 0, \quad b_{ij} \leq 0, & \quad \text{pokud } i = j \text{ nebo } i = k, \\ a_{ijk} \geq 0, \quad b_{ij} \geq 0, & \quad \text{pokud } i \neq j \text{ a } i \neq k. \end{aligned}$$

Dále předpokládáme, že každá chemická rovnice $\mathcal{R} \in \mathfrak{R}$ splňuje zákon zachování hmoty, tj. chemická rovnice je správně vyčíslena. Tento předpoklad je na první pohled samozřejmý a pro zajištění rozumných vlastností vzniklé soustavy parciálních diferenciálních rovnic patrně nezbytný. Předpoklad ovšem není v konkrétních případech splněn, protože uvažujeme reakce ve vodném prostředí, ale vodu samotnou z reakcí a z bilance hmoty vynecháváme.

Zákon zachování hmoty pro obecnou reakci (2.3) je ekvivalentní rovnici pro stechiometrické koeficienty

$$\sum_{\ell=1}^m \mu_{\ell} \mathbf{m}_{j_{\ell}} = \sum_{\ell=1}^n \nu_{\ell} \mathbf{m}_{i_{\ell}},$$

kde $\mathbf{m}_i > 0$ je (například) relativní molekulová hmotnost látky S_i . Pro uvažované tři typy reakcí tedy

$$\mathbf{m}_{j_{\mathcal{R}}} + \mathbf{m}_{k_{\mathcal{R}}} = \sum_{\ell=1}^{n_{\mathcal{R}}} \nu_{\ell}^{\mathcal{R}} \mathbf{m}_{i_{\ell}^{\mathcal{R}}}, \quad \text{pro reakci } \mathcal{R} \text{ typu (2.4),}$$

$$2\mathbf{m}_{j_{\mathcal{R}}} = \sum_{\ell=1}^{n_{\mathcal{R}}} \nu_{\ell}^{\mathcal{R}} \mathbf{m}_{i_{\ell}^{\mathcal{R}}}, \quad \text{pro reakci } \mathcal{R} \text{ typu (2.5),}$$

$$\mathbf{m}_{j_{\mathcal{R}}} = \sum_{\ell=1}^{n_{\mathcal{R}}} \nu_{\ell}^{\mathcal{R}} \mathbf{m}_{i_{\ell}^{\mathcal{R}}}, \quad \text{pro reakci } \mathcal{R} \text{ typu (2.6).}$$

Pro každou bimolekulovou reakci \mathcal{R} typu (2.4) z (2.8) plyne

$$\sum_{i=1}^L \mathbf{m}_i r_i^{\mathcal{R}} = \kappa^{\mathcal{R}} c_{j\mathcal{R}} c_{k\mathcal{R}} \left[-\mathbf{m}_{j\mathcal{R}} - \mathbf{m}_{k\mathcal{R}} + \sum_{\ell=1}^{n^{\mathcal{R}}} \mathbf{m}_{i_{\ell}^{\mathcal{R}}} \right] = 0.$$

Z vyjádření reakčních členů (2.8), (2.9) snadno zjistíme, že tato rovnost platí pro každou reakci $\mathcal{R} \in \mathfrak{R}$. Zřejmě

$$\sum_{i=1}^L \mathbf{m}_i a_{ijk}^{\mathcal{R}} = 0, \quad \sum_{i=1}^L \mathbf{m}_i b_{ij}^{\mathcal{R}} = 0, \quad j, k = 1, \dots, L, \quad \mathcal{R} \in \mathfrak{R}.$$

Sečtením těchto rovnic přes všechny reakce systému \mathfrak{R} dostaneme rovnice pro koeficienty a_{ijk} , b_{ij}

$$\sum_{i=1}^L \mathbf{m}_i a_{ijk} = 0, \quad \sum_{i=1}^L \mathbf{m}_i b_{ij} = 0, \quad j, k = 1, \dots, L.$$

Soustava

Od integrálů přes referenční objemy V můžeme, vzhledem k libovolnému výběru V , přejít k diferenciálním rovnicím v Ω . Výsledná soustava pro koncentrace c_1, \dots, c_L je

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} = D_i \Delta c_i + \sum_{j,k=1}^L a_{ijk} c_j c_k + \sum_{j=1}^L b_{ij} c_j, \quad (x, t) \in \Omega \times (0, T), \quad (2.11)$$

$$i = 1, \dots, L.$$

Symbol Δ značí Laplaceův operátor,

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_3^2}.$$

2.4.2 Okrajové a počáteční podmínky

Před stanovením okrajové podmínky pro funkce c_i splňující (2.11) se vrátíme k fyzikální stránce úlohy a připomeneme si, jaký vývoj v čase od reagujících chemických látek očekáváme.

Jako reagující látky uvažujeme nestabilní radikály vzniklé ionizací vody a dále stabilní látky přítomné v roztoku před ozáření. Můžeme předpokládat, že stabilní látky jsou v okamžiku vzniku clusteru rozptýleny v okolním prostoru rovnoměrně. Naopak molekuly radikálů budou soustředěny v okolí jednoho bodu. Očekávaný vývoj je takový, že po jistém čase se radikály postupně rekombinují na stabilní látky a jejich koncentrace s časem klesá k nule. V jisté vzdálenosti od místa vzniku clusteru a v jisté době po okamžiku jeho vzniku jsou koncentrace radikálů již zanedbatelně malé.

Uvážíme-li tento očekávaný průběh řešení a také nutnost řešit soustavu numericky, rozhodneme se pro omezenou oblast Ω . Volba velikosti a tvaru oblasti Ω je do značné míry libovolná. Budeme vždy uvažovat kouli se středem v počátku souřadnic a jistým poloměrem $R > 0$.

Pro koncentrace radikálů uvažujeme počáteční podmínku s kompaktním nosičem v Ω , a můžeme pro ně předepsat například homogenní Dirichletovu okrajovou podmínku

$$c_i(x) = 0, \quad x \in \partial\Omega,$$

nebo homogenní Neumannovu podmínku

$$\frac{\partial c_i}{\partial n}(x) = 0, \quad x \in \partial\Omega.$$

Význam Dirichletovy podmínky je jasný, Neumannova podmínka popisuje stav s nulovým spádem koncentrace a nulovým tokem látky přes hranici výpočetní oblasti. Z hlediska původního fyzikálního problému není ani jeden typ podmínky preferován.

U stabilních látek se dále nabízí předpoklad $D_i = 0$, tj. že látka nepodléhá difuzi. To lze přijmout u formální DNA (viz str. 19), u ostatních stabilních látek (rozpuštěný kyslík) je tento předpoklad nefyzikální (a zbytečný - pokud známe hodnotu difuzního součinitele, můžeme ji do PDE dosadit). Jestliže $D_i = 0$, potom PDE neobsahuje derivace neznámé funkce c_i podle prostorových proměnných a přestává mít charakter smíšené úlohy. Je to soustava obyčejných rovnic pro koncentrace v různých bodech oblasti Ω . Okrajová podmínka pro i -tou látku v případě $D_i = 0$ nemůže řešení nijak ovlivnit a není potřeba se jí dále zabývat.

Zbývá případ stabilní látky s $D_i > 0$. Uvažujeme počáteční podmínku $c_i(x, 0) = \text{konst.}$ a Neumannovu okrajovou podmínku. To usnadní případné úvahy týkající se zákona zachování hmoty.

Závěr diskuze

Soustavu budeme řešit uvnitř koule Ω s poloměrem R . Soustavu doplníme Neumannovými okrajovými podmínkami a vhodnými počátečními podmínkami

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_i}{\partial n}(x, t) &= 0, & (x, t) \in \partial\Omega \times (0, T), \\ c_i(x, 0) &= c_i^0(x), & x \in \Omega. \end{aligned} \tag{2.12}$$

Symbol $\partial/\partial n$ zde znamená derivaci podle vnější normály k hranici $\partial\Omega$.

2.4.3 Modelování reakcí radikálů s molekulou DNA

Dosud jsme se zabývali výpočtem koncentrací vodných radikálů. Tyto koncentrace však nelze experimentálně určit. Jedinou veličinou, kterou lze zjistit experimentálně, je počet dvojných zlomů.

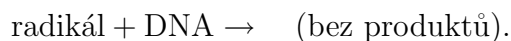
Pro kvantifikaci poškození DNA používáme pravděpodobnost vzniku jednoduchého zlomu p_{SSB} a pravděpodobnost vzniku dvojného zlomu p_{DSB} . p_{SSB} resp. p_{DSB} interpretujeme jako pravděpodobnost vzniku zlomu na jednom nukleotidovém páru molekuly DNA při daném ozáření. Podle [1]

$$p_{DSB} \approx p_{SSB}^2.$$

Uvedeme dva možné způsoby výpočtu p_{DSB} . Oba modely obsahují volné parametry, které je třeba nastavit zkusmo, a žádný z nich pravděpodobně nedá absolutní hodnoty p_{DSB} . Model budeme považovat za přijatelný, pokud bude závislost p_{DSB} na vstupních datech (zvláště na koncentraci kyslíku) kvalitativně odpovídat průběhu známém z experimentálních dat [5].

Výpočet DSB pomocí formální DNA

Napadení molekuly DNA reaktivními radikály modelujeme tak, že do soustavy přidáme další látku, která bude odpovídat nukleotidovým párům nebo fosfátovým vazbám na molekule DNA. Přidáme také příslušné chemické reakce typu



Látku nazveme formální DNA, abychom zdůraznili, že se nejedná o vlastní molekuly DNA, a že její zavedení je poměrně hrubé zjednodušení skutečnosti.

Nastavíme vhodně počáteční podmínku DNA tak, aby úbytek formální DNA v celé výpočetní oblasti approximoval počet jednoduchých zlomů. V systému látek (2.2) přiřadíme formální DNA index $i = 1$ a položíme

$$\begin{aligned} N_1(t) &= \int_{\Omega} c_1(x, t) dx, & t \geq 0 \\ p_{SSB} &= N_1(0) - \lim_{t \rightarrow \infty} N_1(t), \\ p_{DSB} &= p_{SSB}^2. \end{aligned} \tag{2.13}$$

Výhodou této metody je snadná implementace a možnost použít známé rychlostní konstanty radikálů s DNA. Nevýhodou je nutnost nastavit zkusmo počáteční podmínku pro formální DNA. Může se stát (viz odstavec 5.3), že reakce radikálů s formální DNA převládnu nad rekombinačními reakcemi. Takové chování není z fyzikálního hlediska pravděpodobné.

Výpočet DSB průměrem přes různé časy setkání

Upravíme postup výpočtu DSB použitý v [1]. Tento postup vychází z faktu, že cluster radikálů může vzniknout v různých vzdálenostech od molekuly DNA. Cluster se zvětšuje difuzí a radikály se dostanou do blízkosti DNA až po jistém čase od vzniku clusteru. Předpokládáme, že počet jednoduchých zlomů vzniklých při setkání clusteru s DNA je

úměrný množství radikálů v okamžiku setkání. Čas setkání ovšem neznáme, vezmeme integrální průměr přes všechny možné časy setkání. Čas omezíme tak, aby účinné byly pouze clusterly s více než $N_{min} = 1$ molekulami. Formálně

$$N_i = \int_{\Omega} c_i(x, t) dx, \quad t \geq 0, \quad i = 1, \dots, L, \quad (2.14)$$

$$t_m = \inf \left\{ t > 0 : \sum_{\substack{i=1 \\ \alpha_i \neq 0}}^L N_i(t) < N_{min} \right\}, \quad (2.15)$$

$$p_{SSB} = \int_0^{t_m} \sum_{i=1}^L \alpha_i N_i(t) dt, \quad (2.16)$$

$$p_{DSB} = p_{SSB}^2. \quad (2.17)$$

Nezáporné koeficienty α_i vyjadřující účinnost jednotlivých radikálů zvolíme úměrné rychlostním konstantám jejich reakcí s DNA. Pro látky, které s DNA nereagují, položíme $\alpha_i = 0$.

Zdůrazněme, že integrál (2.16) neinterpretujeme jako průměrné množství radikálů v jednom clusteru, ale jako průměr přes různé clusterly, které se s DNA setkávají v různých časech. Hodnota integrandu $c_i(x, t)$ pochopitelně závisí přes diferenciální rovnici (2.11) také na stavech $c_i(x, \tau)$ pro $\tau < t$. Předpokládáme stejný počáteční stav všech clusterů a stejný vývoj až do okamžiku setkání s molekulou DNA.

Kapitola 3

Formulace problému

V této části upřesníme po matematické stránce formulaci soustavy parciálních diferenciálních rovnic a předpoklady o koeficientech a počátečních datech. Sestavíme slabou formulaci, uvedeme požadavky na regularitu řešení a dokážeme jednoznačnost slabého řešení (věta 2, str. 29).

Za předpokladu sférické symetrie přejdeme k úloze s jedinou prostorovou proměnnou a ukážeme její souvislost s původní trojrozměrnou úlohou (věta 3, str. 44). Konečně se pokusíme dokázat existenci řešení jednorozměrné úlohy (věta 4, str. 55).

V této teoretické části předpokládáme kladné difuzní koeficienty. Písmeno C označuje v různých výrazech různé konstanty (při pevně zvolených datech úlohy).

Předpoklad 1. *Nechť je dáno $L \in \mathbb{N}$ a čísla*

$$a_{ijk} \in \mathbb{R}, \quad b_{ij} \in \mathbb{R}, \quad D_i \in \mathbb{R}, \quad i, j, k = 1, \dots, L \quad (3.1)$$

taková, že

1. $D_i > 0$ pro každé $i = 1, \dots, L$.

2. *Platí nerovnosti*

$$\begin{aligned} a_{ijk} \leq 0, \quad b_{ij} \leq 0, & \quad \text{pokud } i = j \text{ nebo } i = k, \\ a_{ijk} \geq 0, \quad b_{ij} \geq 0, & \quad \text{pokud } i \neq j \text{ a } i \neq k. \end{aligned} \quad (3.2)$$

3. *Existují čísla $\mathbf{m}_i > 0$, $i = 1, \dots, L$ taková, že*

$$\sum_{i=1}^L \mathbf{m}_i a_{ijk} = 0, \quad \sum_{i=1}^L \mathbf{m}_i b_{ij} = 0, \quad j, k = 1, \dots, L. \quad (3.3)$$

Nechť je dáno $T > 0$ a $R > 0$. Nechť

$$\Omega = \{x \in \mathbb{R}^3 : |x| < R\}. \quad (3.4)$$

Úloha 1. Necht' platí předpoklady (3.1)-(3.4) a jsou dány funkce

$$c_i^0 : \Omega \rightarrow \mathbb{R}, \quad i = 1, \dots, L. \quad (3.5)$$

Hledáme funkce

$$c_i : \Omega \times (0, T) \rightarrow \mathbb{R}, \quad i = 1, \dots, L \quad (3.6)$$

splňující diferenciální rovnice

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} = D_i \Delta c_i + \sum_{j,k=1}^L a_{ijk} c_j c_k + \sum_{j=1}^L b_{ij} c_j, \quad \begin{array}{l} (x, t) \in \Omega \times (0, T), \\ i = 1, \dots, L, \end{array} \quad (3.7)$$

okrajové podmínky

$$\frac{\partial c_i}{\partial n} = 0, \quad (x, t) \in \partial\Omega \times (0, T), \quad i = 1, \dots, L, \quad (3.8)$$

a počáteční podmínky

$$c_i(x, 0) = c_i^0(x), \quad x \in \Omega, \quad i = 1, \dots, L. \quad (3.9)$$

3.1 Slabá formulace

Nelineární členy v rovnici (3.7) neobsahují derivace, (3.8) jsou přirozené okrajové podmínky pro Laplaceův operátor. Slabou formulaci odvodíme způsobem analogickým k odvození slabé formulace pro lineární parabolickou rovnici.

3.1.1 Prostory funkcí

Při definici slabého řešení využijeme Lebesgueův prostor $L^2(\Omega)$ a Sobolevův prostor $H^1(\Omega)$. Prostorové derivace tedy nahrazujeme slabými derivacemi.

Co se týče časových derivací, využíváme konceptu „evoluční trojice prostorů“ (viz [28], [22])

$$H^1(\Omega) \hookrightarrow L^2(\Omega) \hookrightarrow [H^1(\Omega)]^*. \quad (3.10)$$

Symbolika (3.10) vyjadřuje identifikaci prvků prostoru $H^1(\Omega)$ s prvky duálu $[H^1(\Omega)]^*$ pomocí skalárního součinu $(\cdot, \cdot)_{L^2(\Omega)}$ prostoru $L^2(\Omega)$. Každému prvku $w \in H^1(\Omega)$ je přiřazen funkcionál $w^* \in [H^1(\Omega)]^*$ rovnicí

$$\langle v, w^* \rangle_{H^1(\Omega), [H^1(\Omega)]^*} = (v, w)_{L^2(\Omega)}, \quad v \in H^1(\Omega).$$

Prvky w a w^* ztotožňujeme¹ a v tomto smyslu chápeme vnoření

$$H^1(\Omega) \hookrightarrow [H^1(\Omega)]^*.$$

¹Snad je vhodné ještě zdůraznit, že přestože $H^1(\Omega)$ je Hilbertův prostor se skalárním součinem

$$(v, w)_{H^1(\Omega)} = \int_{\Omega} (uv + \nabla u \cdot \nabla v) \, dx, \quad u, v \in H^1(\Omega),$$

Pojem evoluční trojice prostorů umožňuje zobecnit pojem časové derivace. Každé lokálně bochnerovsky integrovatelné (abstraktní) funkci

$$u : (0, T) \rightarrow H^1(\Omega)$$

lze přiřadit derivaci ve smyslu distribucí s hodnotami v prostoru $H^1(\Omega)$. Tato derivace je lineární zobrazení

$$\dot{u} : C_0^\infty(0, T) \rightarrow H^1(\Omega)$$

z prostoru všech nekonečně hladkých reálných funkcí s kompaktním nosičem v intervalu $(0, T)$ do $H^1(\Omega)$, definované rovnicí

$$\dot{u}(\varphi) = - \int_0^T \varphi'(t)u(t) dt, \quad \varphi \in C_0^\infty(0, T).$$

Pokud $u \in C^1([0, T]; H^1(\Omega))$, platí

$$\dot{u}(\varphi) = \int_0^T \varphi(t)u'(t) dt, \quad \varphi \in C_0^\infty(0, T), \quad (3.11)$$

kde

$$u'(t) = \lim_{\substack{s \rightarrow t \\ s \in [0, T]}} \frac{1}{s-t} (u(s) - u(t)) \in H^1(\Omega), \quad t \in [0, T].$$

Rovnost (3.11) je rovnost v prostoru $H^1(\Omega)$.

Obecně nemusí být $u \in C^1([0, T]; H^1(\Omega))$. Pripusťme

$$u \in L^2(0, T; H^1(\Omega)).$$

Jestliže existuje funkce $g \in L^2(0, T; [H^1(\Omega)]^*)$ taková, že platí rovnost

$$\dot{u}(\varphi) = \int_0^T \varphi(t)g(t) dt, \quad \varphi \in C_0^\infty(0, T), \quad (3.12)$$

potom můžeme funkci g považovat za reprezentaci derivace \dot{u} . Poslední rovnost je třeba chápat jako rovnost v prostoru $[H^1(\Omega)]^*$. Jinak řečeno, požadujeme, aby pro každé $\varphi \in C_0^\infty(0, T)$ a $v \in H^1(\Omega)$ platila rovnost

$$\langle v, \dot{u}(\varphi) \rangle_{H^1(\Omega), [H^1(\Omega)]^*} \equiv (v, \dot{u}(\varphi))_{L^2(\Omega)} = \int_0^T \varphi(t) \langle v, g(t) \rangle_{H^1(\Omega), [H^1(\Omega)]^*} dt$$

neztotožňujeme $H^1(\Omega)$ s $[H^1(\Omega)]^*$ pomocí součinu $(v, w)_{H^1(\Omega)}$, ale na první pohled nepřírozně pomocí $(\cdot, \cdot)_{L^2(\Omega)}$. Způsoby ztotožnění nejsou ekvivalentní. Při ztotožnění pomocí $(\cdot, \cdot)_{H^1(\Omega)}$ je $H^1(\Omega) = [H^1(\Omega)]^*$, při $(\cdot, \cdot)_{L^2(\Omega)}$ je $H^1(\Omega) \subsetneq [H^1(\Omega)]^*$, jak je vidět z vět o regularitě slabých řešení eliptických rovnic.

neboli

$$-\int_0^T \varphi'(t) (v, u(t))_{L^2(\Omega)} dt = \int_0^T \varphi(t) \langle v, g(t) \rangle_{H^1(\Omega), [H^1(\Omega)]^*} dt. \quad (3.13)$$

Takto ztotožníme derivaci s prvkem prostoru $L^2(0, T; [H^1(\Omega)]^*)$. Definujeme prostor

$$W^{1,2}(0, T; L^2(\Omega), H^1(\Omega)) = \{u \in L^2(0, T; H^1(\Omega)) : \dot{u} \in L^2(0, T; [H^1(\Omega)]^*)\}.$$

s normou

$$\|u\|_{W^{1,2}(0, T; L^2(\Omega), H^1(\Omega))} = \left[\|u\|_{L^2(0, T; H^1(\Omega))}^2 + \|\dot{u}\|_{L^2(0, T; [H^1(\Omega)]^*)}^2 \right]^{\frac{1}{2}}.$$

Nejdůležitější vlastnosti prostorů funkcí, které budeme potřebovat dále, jsou

Vlastnost 1.

1. Prostory $L^2(\Omega)$ a $H^1(\Omega)$ jsou separabilní Hilbertovy prostory. Množina $C^\infty(\overline{\Omega})$ tvoří hustý podprostor prostoru $H^1(\Omega)$.

2. Platí vnoření $H^1(\Omega) \hookrightarrow L^6(\Omega)$, vnoření $H^1(\Omega) \hookrightarrow L^2(\Omega)$ je kompaktní.

3. Prostory $L^2(0, T; L^2(\Omega))$, $L^2(0, T; H^1(\Omega))$ jsou separabilní Hilbertovy prostory. Prostory

$$L^2(0, T; [H^1(\Omega)]^*), \quad W^{1,2}(0, T; L^2(\Omega), H^1(\Omega))$$

jsou separabilní a reflexivní Banachovy prostory. Množina $C^\infty([0, T]; H^1(\Omega))$ tvoří hustý podprostor prostoru $W^{1,2}(0, T; L^2(\Omega), H^1(\Omega))$.

4. Platí vnoření

$$W^{1,2}(0, T; L^2(\Omega), H^1(\Omega)) \hookrightarrow C([0, T]; L^2(\Omega)),$$

vnoření

$$W^{1,2}(0, T; L^2(\Omega), H^1(\Omega)) \hookrightarrow L^2(0, T; L^2(\Omega))$$

je kompaktní.

5. Platí zobecněné pravidlo o integraci per partes

$$\begin{aligned} (u(t), v(t))_{L^2(\Omega)} - (u(s), v(s))_{L^2(\Omega)} &= \\ &= \int_s^t \left(\langle u(\tau), \dot{v}(\tau) \rangle_{H^1(\Omega), [H^1(\Omega)]^*} + \langle v(\tau), \dot{u}(\tau) \rangle_{H^1(\Omega), [H^1(\Omega)]^*} \right) d\tau, \\ &0 \leq s \leq t \leq T, \quad u, v \in W^{1,2}(0, T; L^2(\Omega), H^1(\Omega)). \end{aligned} \quad (3.14)$$

Důkaz. Viz [28].

□

3.1.2 Definice slabého řešení

Nyní můžeme definovat slabé řešení. Používáme označení

$$\begin{aligned} (u, v)_{L^2(\Omega)} &= \int_{\Omega} uv \, dx, & u, v &\in L^2(\Omega), \\ [u, v]_{H^1(\Omega)} &= \int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla v \, dx, & u, v &\in H^1(\Omega). \end{aligned}$$

Úloha 2. *Nechť platí předpoklady (3.1)-(3.4) a jsou dány funkce*

$$c_i^0 \in L^2(\Omega), \quad i = 1, \dots, L. \quad (3.15)$$

Hledáme funkce

$$c_i \in W^{1,2}(0, T; L^2(\Omega), H^1(\Omega)), \quad i = 1, \dots, L, \quad (3.16)$$

splňující pro s.v. $t \in (0, T)$, všechna $i = 1, \dots, L$ a všechna $v \in H^1(\Omega)$ identitu

$$\langle v, \dot{c}_i \rangle_{H^1(\Omega), [H^1(\Omega)]^*} = -D_i[v, c_i]_{H^1(\Omega)} + \int_{\Omega} v \left(\sum_{j,k=1}^L a_{ijk} c_j c_k + \sum_{j=1}^L b_{ij} c_j \right) dx \quad (3.17)$$

a počáteční podmínku (rovnost v prostoru $L^2(\Omega)$)

$$c_i(0) = c_i^0, \quad i = 1, \dots, L. \quad (3.18)$$

Souvislost slabého řešení s klasickou formulací udává následující věta.

Věta 1. *Nechť jsou funkce c_i , $i = 1, \dots, L$ řešením úlohy (3.15)-(3.18). Potom funkce c_i splňují (3.7) ve smyslu distribucí. Jestliže navíc*

$$c_i \in C^2(\overline{\Omega} \times [0, T]), \quad c_i^0 \in C^1(\overline{\Omega}) \quad i = 1, \dots, L$$

a je splněna podmínka kompatibility

$$\frac{\partial c_i^0}{\partial n}(x) = 0, \quad x \in \partial\Omega,$$

potom platí (3.7), (3.8), (3.9) bodově.

Důkaz. I. *Nechť $\varphi \in C_0^\infty(\Omega)$, $\psi \in C_0^\infty(0, T)$ jsou libovolné funkce. Dosadíme do (3.17) testovací funkci*

$$v(x, t) = \varphi(x)\psi(t), \quad (x, t) \in \Omega \times (0, T), \quad (3.19)$$

a rovnici zintegrujeme podle proměnné t . Na levé straně podle (3.12) vyjde

$$\int_0^T \langle v, \dot{c}_i \rangle_{H^1(\Omega), [H^1(\Omega)]^*} dt = \int_0^T \psi(t) \langle \varphi, \dot{c}_i \rangle_{H^1(\Omega), [H^1(\Omega)]^*} dt$$

$$= - \int_0^T \psi'(t) (\varphi, c_i)_{L^2(\Omega)} dt = - \iint_{\Omega \times (0, T)} \frac{\partial v}{\partial t} c_i dx dt,$$

na pravé straně integrujeme difuzní člen per partes

$$\begin{aligned} - D_i \int_0^T [v, c_i]_{H^1(\Omega)} dt &= - D_i \int_0^T \psi(t) \left(\int_{\Omega} \nabla \varphi \cdot \nabla c_i dx \right) dt \\ &= D_i \int_0^T \psi(t) \left(\int_{\Omega} c_i \Delta \varphi dx \right) dt = D_i \iint_{\Omega \times (0, T)} c_i \Delta v dx dt. \end{aligned}$$

Platí

$$- \iint_{\Omega \times (0, T)} \frac{\partial v}{\partial t} c_i dx dt, = D_i \iint_{\Omega \times (0, T)} c_i \Delta v dx dt + \iint_{\Omega \times (0, T)} v \left(\sum_{j,k=1}^L a_{ijk} c_j c_k + \sum_{j=1}^L b_{ij} c_j \right) dx dt.$$

Tato rovnost platí dokonce pro všechny funkce $v \in C_0^\infty(\Omega \times (0, T))$, protože lineární obal množiny všech funkcí tvaru (3.19) je hustý v prostoru $C_0^\infty(\Omega \times (0, T))$ (s obvyklou topologií lokálně stejnoměrné konvergence - v prostoru $\mathcal{D}(\Omega \times (0, T))$). Rovnice (3.7) platí ve smyslu distribucí.

II. Je-li $c_i \in C^2(\bar{\Omega} \times [0, T])$, splývají klasické derivace s distributivními, rovnice (3.7) tedy platí bodově. Podle (3.18) platí

$$c_i(x, 0) = c_i^0(x) \quad \text{pro s.v. } x \in \Omega$$

a funkce $x \mapsto c_i(x, 0)$ je spojitá, takže platí (3.9) bodově.

Do (3.17) dosadíme opět testovací funkci v tvaru (3.19), tentokrát s $\varphi \in C^\infty(\bar{\Omega})$, $\psi \in C_0^\infty(0, T)$ a integrací per partes vyjde

$$\begin{aligned} \iint_{\Omega \times (0, T)} v \frac{\partial c_i}{\partial t} dx dt &= - D_i \int_0^T \psi \left(\int_{\partial \Omega} \varphi \frac{\partial c_i}{\partial n} dS - \int_{\Omega} \varphi \Delta c_i dx \right) dt \\ &\quad + \iint_{\Omega \times (0, T)} v \left(\sum_{j,k=1}^L a_{ijk} c_j c_k + \sum_{j=1}^L b_{ij} c_j \right) dx dt. \end{aligned}$$

Difuzní koeficienty D_i jsou kladné a platí diferenciální rovnice (3.7), tedy

$$\int_0^T \psi(t) \int_{\partial \Omega} \varphi(x) \frac{\partial c_i}{\partial n} dS dt = 0$$

a nutně

$$\frac{\partial c_i}{\partial n}(x, t) = 0, \quad x \in \partial \Omega, t \in (0, T). \quad \square$$

3.1.3 Jednoznačnost slabého řešení

Pro důkaz jednoznačnosti budeme potřebovat jednu z variant Gronwallovy nerovnosti a jistou vlastnost lokální lipschitzovskosti nelineárního členu.

Vlastnost 2 (Gronwallova nerovnost). *Nechť $K \subset \mathbb{R}$ je interval, $\eta \in \mathbb{R}$, $\eta > 0$, $s \in K$, a pro funkce $\rho, \xi : K \rightarrow \mathbb{R}$ a platí*

1. ρ je lokálně integrovatelná nezáporná,
2. ξ je spojitá nezáporná,
3. $\xi(t) \leq \eta + \left| \int_s^t \rho(\tau) \xi(\tau) \, d\tau \right|$ pro každé $t \in K$.

Potom

$$\xi(t) \leq \eta \exp \left\{ \left| \int_s^t \rho(\tau) \, d\tau \right| \right\}, \quad t \in K.$$

Důkaz. Viz [9]. □

Lemma 1. *Existuje $C > 0$ tak, že pro všechna*

$$v, u_1, u_2, \tilde{u}_1, \tilde{u}_2 \in H^1(\Omega)$$

a všechna $\varepsilon > 0$ platí nerovnost

$$\left| \int_{\Omega} v (u_1 u_2 - \tilde{u}_1 \tilde{u}_2) \, dx \right| \leq C\varepsilon \|v\|_{H^1(\Omega)}^2 + C\varepsilon^{-1} \left(\|u_1 - \tilde{u}_1\|_{L^2(\Omega)}^2 + \|u_2 - \tilde{u}_2\|_{L^2(\Omega)}^2 \right) \cdot \left(\|u_1\|_{H^1(\Omega)}^2 + \|u_2\|_{H^1(\Omega)}^2 + \|\tilde{u}_1\|_{H^1(\Omega)}^2 + \|\tilde{u}_2\|_{H^1(\Omega)}^2 \right).$$

Důkaz. Plyne z odhadu

$$|u_1 u_2 - \tilde{u}_1 \tilde{u}_2| \leq |u_1 u_2 - u_1 \tilde{u}_2| + |u_1 \tilde{u}_2 - \tilde{u}_1 \tilde{u}_2| \leq |u_1| |u_2 - \tilde{u}_2| + |\tilde{u}_2| |u_1 - \tilde{u}_1|,$$

Hölderovy nerovnosti (s exponenty $p_1 = 6$, $p_2 = 3$, $p_3 = 2$), věty o vnoření

$$\begin{aligned} \left| \int_{\Omega} v (u_1 u_2 - \tilde{u}_1 \tilde{u}_2) \, dx \right| &\leq \|v\|_{L^6(\Omega)} \|u_1\|_{L^3(\Omega)} \|u_2 - \tilde{u}_2\|_{L^2(\Omega)} + \|v\|_{L^6(\Omega)} \|\tilde{u}_2\|_{L^3(\Omega)} \|u_1 - \tilde{u}_1\|_{L^2(\Omega)} \\ &\leq C \|v\|_{H^1(\Omega)} \left(\|u_1 - \tilde{u}_1\|_{L^2(\Omega)}^2 + \|u_2 - \tilde{u}_2\|_{L^2(\Omega)}^2 \right)^{\frac{1}{2}} \\ &\quad \cdot \left(\|u_1\|_{H^1(\Omega)}^2 + \|u_2\|_{H^1(\Omega)}^2 + \|\tilde{u}_1\|_{H^1(\Omega)}^2 + \|\tilde{u}_2\|_{H^1(\Omega)}^2 \right)^{\frac{1}{2}} \end{aligned}$$

a Youngovy nerovnosti

$$ab = (\varepsilon^{\frac{1}{2}} a)(\varepsilon^{-\frac{1}{2}} b) \leq \frac{1}{2} \varepsilon a^2 + \frac{1}{2} \varepsilon^{-1} b^2, \quad a, b \geq 0. \quad \square$$

Věta 2. Úloha (3.15)-(3.18) má nejvýše jedno řešení.

Důkaz. Necht $c = (c_1, \dots, c_L)$ a $\tilde{c} = (\tilde{c}_1, \dots, \tilde{c}_L)$ jsou dvě řešení úlohy (3.15)-(3.18). Pro rozdíl

$$w_i = c_i - \tilde{c}_i \in W^{1,2}(0, T; L^2(\Omega), H^1(\Omega)), \quad i = 1, \dots, L$$

dostaneme z (3.17) a (3.18) dosazením $v = w_i$ rovnost

$$\langle w_i, \dot{w}_i \rangle_{H^1(\Omega), [H^1(\Omega)]^*} = -D_i [w_i, w_i]_{H^1(\Omega)} + \int_{\Omega} w_i \left(\sum_{j,k=1}^L a_{ijk} (c_j c_k - \tilde{c}_j \tilde{c}_k) + \sum_{j=1}^L b_{ij} w_j \right) dx,$$

kteřá platí pro skoro všechna $t \in (0, T)$ a všechna $i = 1, \dots, L$. Pravou stranu odhadneme podle lemmatu 1 výrazem

$$\begin{aligned} & -D_i [w_i, w_i]_{H^1(\Omega)} + C\varepsilon \|w_i\|_{H^1(\Omega)}^2 \\ & + C\varepsilon^{-1} \left(\sum_{j=1}^L \|w_j\|_{L^2(\Omega)}^2 \right) \left(\sum_{j=1}^L \|c_j\|_{H^1(\Omega)}^2 + \sum_{i=1}^L \|\tilde{c}_j\|_{H^1(\Omega)}^2 \right) + C \sum_{j=1}^L \|w_i\|_{L^2(\Omega)}^2. \end{aligned} \quad (3.20)$$

Difuzní koeficienty D_i jsou kladná čísla,

$$-D_i [w_i, w_i]_{H^1(\Omega)} + C\varepsilon \|w_i\|_{H^1(\Omega)}^2 = (C\varepsilon - D_i) [w_i, w_i]_{H^1(\Omega)} + C\varepsilon \|w_i\|_{L^2(\Omega)}^2.$$

Lze zvolit $\varepsilon > 0$ tak, aby pro každé i byl (3.20) majorizován výrazem

$$C \left(1 + \sum_{j=1}^L \|c_j\|_{H^1(\Omega)}^2 + \sum_{j=1}^L \|\tilde{c}_j\|_{H^1(\Omega)}^2 \right) \left(\sum_{j=1}^L \|w_j\|_{L^2(\Omega)}^2 \right).$$

Platí $w_i(0) = 0$, použijeme zobecněné pravidlo (3.14) o integraci per partes

$$\begin{aligned} \|w_i\|_{L^2(\Omega)}^2 &= 2 \int_0^T \langle w_i, \dot{w}_i \rangle_{H^1(\Omega), [H^1(\Omega)]^*} dt \leq \\ &\leq C \int_0^T \left(1 + \sum_{j=1}^L \|c_j\|_{H^1(\Omega)}^2 + \sum_{j=1}^L \|\tilde{c}_j\|_{H^1(\Omega)}^2 \right) \left(\sum_{j=1}^L \|w_j\|_{L^2(\Omega)}^2 \right) dt. \end{aligned}$$

Sečtením těchto nerovností přes $i = 1, \dots, L$ dostaneme

$$\xi(t) \leq \int_0^t \rho(s) \xi(s) ds, \quad t \in [0, T],$$

kde

$$\xi(t) = \sum_{i=1}^L \|w_i\|_{L^2(\Omega)}^2, \quad t \in [0, T],$$

$$\rho(t) = C \left(1 + \sum_{i=1}^L \|c_i\|_{H^1(\Omega)}^2 + \sum_{i=1}^L \|\tilde{c}_i\|_{H^1(\Omega)}^2 \right), \quad \text{pro s.v. } t \in (0, T).$$

Funkce ξ je spojitá a funkce ρ integrovatelná, protože

$$W^{1,2}(0, T; L^2(\Omega), H^1(\Omega)) \subset C([0, T]; L^2(\Omega)) \cap L^2(0, T; H^1(\Omega)).$$

Z Gronwallovy nerovnosti plyne

$$\xi(t) \leq \eta \exp \left\{ \int_0^t \rho(\tau) d\tau \right\}, \quad t \in [0, T],$$

pro každé $\eta > 0$. Tedy $\xi(t) = 0$ a $w_i(t) = 0$ pro všechna $t \in [0, T]$ a všechna $i = 1, \dots, L$. \square

3.2 Přejchod k jednorozměrnému problému

Úlohu (3.5)-(3.9) resp. (3.15)-(3.18) zjednodušíme pomocí předpokladu sférické symetrie. Předpoklad není nikterak omezující. Zvolíme-li totiž sféricky symetrické počáteční podmínku, bude i řešení sféricky symetrické. Symetrii počátečního stavu lze zdůvodnit chaotickým tvarem konců drah sekundárních částic. Naopak volba nesymetrické počáteční podmínky není ničím oprávněna, protože konkrétní průběh koncentrace není z experimentů nebo existujících modelů znám. Prakticky je možné určit pouze nějakou počáteční velikost clusteru a množství radikálů.

3.2.1 Odvození jednorozměrné úlohy

Odvodíme nyní jednorozměrnou úlohu neformálním upravováním rovnice (3.17). Vyhne se přitom klasické formulaci jednorozměrné úlohy a odvodíme jen formulaci slabou. Zatím nebudeme precizovat předpoklady ani diskutovat regularitu řešení. Přesné odvození včetně potřebného matematického aparátu je v částech 3.2.2 - 3.2.4.

Do (3.17) dosadíme sféricky symetrické řešení a sféricky symetrickou testovací funkci

$$\begin{aligned} c_i(x, t) &= u_i(|x|, t), & (x, t) &\in \Omega \times (0, T), \\ c_i^0(x) &= u_i^0(|x|), & v(x) &= w(|x|), & x &\in \Omega, \end{aligned}$$

kde

$$u_i : (0, R) \times (0, T) \rightarrow \mathbb{R}, \quad u_i^0 : (0, R) \rightarrow \mathbb{R}, \quad w : (0, R) \rightarrow \mathbb{R}.$$

Pro jedinou prostorovou derivaci funkcí definovaných na intervalu $(0, R)$ budeme zatím používat symbol $\partial/\partial r$. Platí

$$\nabla|x| = \frac{x}{|x|},$$

$$\nabla c_i(x, t) \cdot \nabla v(x) = \frac{\partial u_i(|x|, t)}{\partial r} \frac{x}{|x|} \cdot \frac{\partial w(|x|)}{\partial r} \frac{x}{|x|} = \frac{\partial u_i(|x|, t)}{\partial r} \frac{\partial w(|x|)}{\partial r}.$$

Pro každou sféricky symetrickou funkci $z(x) = \tilde{z}(|x|)$ platí

$$\int_{\Omega} z(x) dx = 4\pi \int_0^R r^2 \tilde{z}(r) dr.$$

Rovnice (3.17) přejde na

$$\int_0^R r^2 w \dot{u}_i dr = -D_i \int_0^R r^2 \frac{\partial w}{\partial r} \frac{\partial u_i}{\partial r} dr + \int_0^R r^2 w \left(\sum_{j,k=1}^L a_{ijk} u_j u_k + \sum_{j=1}^L b_{ij} u_j \right) dr, \\ i = 1, \dots, L, t \in (0, T). \quad (3.21)$$

Poznamenejme, že je možné odvodit i jinou jednorozměrnou formulaci (viz [25]). Dále budeme při formulaci jednorozměrné úlohy vycházet z identity (3.21). Naskytá se ovšem otázka, v jakých prostorech funkcí budeme hledat řešení u_i a testovací funkce w .

Zřejmě by bylo výhodné, aby bilineární formy

$$(u, v) \mapsto \int_0^R r^2 uv dr, \quad (u, v) \mapsto \int_0^R r^2 \frac{\partial u}{\partial r} \frac{\partial v}{\partial r} dr$$

měly úzký vztah k normám, případně skalárním součinům v hledaných prostorech, protože vznikly z forem $(\cdot, \cdot)_{L^2(\Omega)}$ a $[\cdot, \cdot]_{H^1(\Omega)}$, které takové postavení ve struktuře prostorů $L^2(\Omega)$ a $H^1(\Omega)$ mají. Prostor $H^1(0, R)$ tedy vhodný není.

3.2.2 Prostory funkcí pro jednorozměrnou úlohu

Definice 1. Necht' $L_{x^2}^p = L_{x^2}^p(0, R)$, $1 \leq p < \infty$, je množina všech měřitelných funkcí

$$u : (0, R) \rightarrow \mathbb{R}$$

(ztotožňujeme funkce, které se rovnají na množině nulové míry), pro které platí

$$\int_0^R x^2 |u(x)|^p dx < \infty.$$

Prostor $L_{x^2}^p$ opatříme normou

$$\|u\|_{L_{x^2}^p} = \left(\int_0^R x^2 |u(x)|^p dx \right)^{\frac{1}{p}}, \quad u \in L_{x^2}^p.$$

Označme $U = L_{x^2}^2$,

$$(u, v)_U = \int_0^R x^2 u(x)v(x) dx, \quad u, v \in U,$$

$$\|u\|_U = (u, u)_U^{\frac{1}{2}} = \left(\int_0^R x^2 u^2(x) dx \right)^{\frac{1}{2}}, \quad u \in U.$$

Nechť V je množina všech funkcí $u \in U$, jejichž distributivní derivace u_x leží také v prostoru U . Definujeme

$$[u, v]_V = (u_x, v_x)_U = \int_0^R x^2 u_x(x)v_x(x) dx, \quad u, v \in V$$

$$(u, v)_V = (u, v)_U + [u, v]_V = \int_0^R x^2 [u(x)v(x) + u_x(x)v_x(x)] dx, \quad u, v \in V$$

$$\|u\|_V = (u, u)_V^{\frac{1}{2}} = \left(\int_0^R x^2 [u^2(x) + u_x^2(x)] dx \right)^{\frac{1}{2}}, \quad u \in V.$$

Prostory $L_{x^2}^p$ spadají do teorie Lebesgueových prostorů. Vzhledem k faktu, že měřitelná množina $M \subset [0, R]$ má nulovou míru, právě když

$$\int_M x^2 dx = 0,$$

není třeba definovat prostor $L_{x^2}^\infty$.

Prostor V je speciálním případem tzv. Sobolevova prostoru s vahou, viz. [10]. V našem případě je váhová funkce $x \mapsto x^2$ stejná pro funkční hodnoty i derivace. Sobolevovy prostory s vahou mají podobné vlastnosti jako „běžné“ Sobolevovy prostory. V našem případě prostoru V uvidíme souvislosti jak s prostorem $H^1(0, R)$ nad intervalem, tak s prostorem $H^1(\Omega)$ nad třírozměrnou oblastí Ω .

Vlastnost 3. 1. Prostory $L_{x^2}^p$, $1 < p < \infty$, jsou reflexivní a separabilní Banachovy prostory. Množina $C_0^\infty(0, R)$ je hustá podmnožina prostoru $L_{x^2}^p$. Prostor $U = L_{x^2}^2$ je Hilbertův se skalárním součinem $(\cdot, \cdot)_U$.

2. Prostor V , opatřený skalárním součinem $(\cdot, \cdot)_V$, je separabilní Hilbertův prostor. Množina $C^\infty([0, R])$ je hustá podmnožina prostoru V .

3. Platí (vnoření není kompaktní)

$$V \hookrightarrow L^2(0, R).$$

4. Pro každé $r \in (0, R)$ platí

$$V \hookrightarrow H^1(r, R) \hookrightarrow C([r, R]), \quad V \subset AC([r, R]).$$

Speciálně, existuje konstanta $C > 0$ tak, že

$$|u(R)| \leq C \|u\|_V, \quad u \in V. \quad (3.22)$$

Důkaz. Tvzení 1,2,3 jsou dokázána v [10], platnost tvrzení 4 je zřejmá z nerovnosti

$$\int_r^R (u^2 + u_x^2) dx \leq \frac{1}{r^2} \int_r^R x^2 (u^2 + u_x^2) dx, \quad u \in V. \quad (3.23)$$

□

Lemma 2. Vnoření $V \hookrightarrow U$ je kompaktní.

Důkaz. Necht' $\{u_n\}_{n=1}^\infty \subset V$ je libovolná omezená posloupnost v prostoru V . Funkce

$$v_n(x) = xu_n(x), \quad x \in (0, R), \quad n \in \mathbb{N}$$

tvorí omezenou posloupnost v prostoru $H^1(0, R)$,

$$\begin{aligned} \|v_n\|_{H^1(0,R)}^2 &= \int_0^R (|v_n|^2 + |(v_n)_x|^2) dx = \int_0^R (x^2 |u_n|^2 + |x(u_n)_x + u_n|^2) dx \\ &\leq 2 \|u_n\|_V^2 + 2 \|u_n\|_{L^2(0,R)}^2 \leq C \sup_{n \in \mathbb{N}} \|u_n\|_V^2 < \infty. \end{aligned}$$

Vnoření $H^1(0, R) \hookrightarrow L^2(0, R)$ je kompaktní, existuje $v \in L^2(0, R)$ a podposloupnost v_{n_k} tak, že $\lim_{k \rightarrow \infty} \|v_{n_k} - v\|_{L^2(0,R)} = 0$. Funkce

$$u(x) = \frac{v(x)}{x}, \quad x \in (0, R)$$

je prvkem prostoru U . Zřejmě $\lim_{k \rightarrow \infty} \|u_{n_k} - u\|_U = 0$. □

Vlastnost 4. Necht' $a, b \in \mathbb{R}$, $a < b$. Potom $C([a, b]) \hookrightarrow H^1(a, b)$ a platí

$$\sup_{x \in [a,b]} |u(x)| \leq C_1 \|u\|_{H^1(a,b)}^{\frac{1}{2}} \|u\|_{L^2(a,b)}^{\frac{1}{2}}, \quad u \in H^1(a, b), \quad (3.24)$$

kde $C_1 = C_1(b - a)$ závisí spojitě na délce intervalu (a, b) .

Lemma 3. Existuje $C > 0$ tak, že

$$|u(x)| \leq \frac{C}{\sqrt{x}} \|u\|_V, \quad x \in (r, R], \quad u \in V. \quad (3.25)$$

Důkaz. Zvolme $r \in (0, R)$. Z (3.24), (3.23) plyne

$$\sup_{r \leq x \leq R} |u(x)| \leq C_1(R-r) \|u\|_{H^1(r,R)}^{\frac{1}{2}} \|u\|_{L^2(r,R)}^{\frac{1}{2}} \leq \frac{C_1(R-r)}{\sqrt{r}} \|u\|_V^{\frac{1}{2}} \|u\|_{L^2(0,R)}^{\frac{1}{2}}.$$

Z vnoření $V \hookrightarrow L^2(0, R)$ a spojitě závislosti zaručené Vlastností 4 dostaneme nerovnost

$$\sup_{r \leq x \leq R} |u(x)| \leq \frac{C}{\sqrt{r}} \|u\|_V,$$

jejímž přímým důsledkem je (3.25). Konstanta C nezávisí na r . □

Lemma 4. *Pro každé $p \in [2, \infty)$ platí vnoření $V \hookrightarrow L^p_{x^{\frac{p-2}{2}}}$. Speciálně $V \hookrightarrow L^6_{x^2}$.*

Důkaz. Pro každé $u \in V$ a $2 \leq p < \infty$ platí

$$\int_0^R x^{\frac{p-2}{2}} |u|^p dx = \int_0^R \left(x^{\frac{1}{2}} |u|\right)^{p-2} |u|^2 dx \leq C \|u\|_V^{p-2} \|u\|_{L^2(0,R)}^2 \leq C \|u\|_V^p. \quad \square$$

Vnoření $V \hookrightarrow L^6_{x^2}$ je analogické vnoření $H^1(\Omega) \hookrightarrow L^6(\Omega)$, vlastnost (3.22) větě o stopách pro $H^1(\Omega)$. V krajním bodě $x = 0$ definičního oboru, kde je váha nulová, funkce z prostoru V stopy nemají. Na druhé straně, pouze v bodě $x = 0$ mohou mít funkce z V nespojitost a jsou tedy „regulárnější“ než funkce z $H^1(\Omega)$. Předpoklad sférické symetrie tím v sobě zahrnuje jistý předpoklad o regularitě.

Důsledkem uvedených vlastností je možnost zavést pojem evoluční trojice prostorů (ve smyslu definice 23.11. z [28])

$$V \hookrightarrow U \hookrightarrow V^*$$

a prostor

$$W^{1,2}(0, T; U, V) = \{u \in L^2(0, T; V) : \dot{u} \in L^2(0, T; V^*)\}.$$

Související pojmy a tvrzení jsou analogické trojdimenzionálnímu případu.

Vlastnost 5. *1. Prostory $L^2(0, T; U)$, $L^2(0, T; V)$ jsou separabilní Hilbertovy prostory. Prostory $L^2(0, T; V^*)$, $W^{1,2}(0, T; U, V)$ jsou separabilní a reflexivní Banachovy prostory. Množina $C^\infty([0, T]; V)$ tvoří hustý podprostor prostoru $W^{1,2}(0, T; U, V)$.*

2. Platí vnoření

$$W^{1,2}(0, T; U, V) \hookrightarrow C([0, T]; U),$$

vnoření

$$W^{1,2}(0, T; U, V) \hookrightarrow L^2(0, T; U)$$

je kompaktní.

3. Platí zobecněné pravidlo o integraci per partes

$$(u(t), v(t))_U - (u(s), v(s))_U = \int_s^t \left(\langle u(\tau), \dot{v}(\tau) \rangle_{V, V^*} + \langle v(\tau), \dot{u}(\tau) \rangle_{V, V^*} \right) d\tau, \\ 0 \leq s \leq t \leq T, \quad u, v \in W^{1,2}(0, T; U, V). \quad (3.26)$$

S tímto aparátem můžeme definovat řešení jednorozměrné úlohy a dát smysl rovnici (3.21).

3.2.3 Formulace jednorozměrné úlohy

Úloha 3. *Nechť platí předpoklady (3.1)-(3.4) a jsou dány funkce*

$$u_i^0 \in U, \quad i = 1, \dots, L. \quad (3.27)$$

Hledáme funkce

$$u_i \in W^{1,2}(0, T; U, V), \quad i = 1, \dots, L \quad (3.28)$$

splňující pro s.v. $t \in (0, T)$, všechna $i = 1, \dots, L$ a všechna $v \in V$ identitu

$$\langle v, \dot{u}_i \rangle_{V, V^*} = -D_i[v, u_i]_V + \int_0^R x^2 v \left(\sum_{j,k=1}^L a_{ijk} u_j u_k + \sum_{j=1}^L b_{ij} u_j \right) dx \quad (3.29)$$

a počáteční podmínku (rovnost v prostoru U)

$$u_i(0) = u_i^0, \quad i = 1, \dots, L. \quad (3.30)$$

Jednoznačnost řešení úlohy (3.27)-(3.30) plyne z věty 3 dokázané níže a z věty 2 o jednoznačnosti trojrozměrné úlohy.

3.2.4 Souvislost tří- a jednorozměrné úlohy

V části 3.2.1 jsme od řešení $c = (c_1, \dots, c_L)$ trojrozměrné úlohy (3.15)-(3.18) přešli k řešení $u = (u_1, \dots, u_L)$ jednorozměrné úlohy (3.27)-(3.30). V tomto odstavci ukážeme, že z řešení jednorozměrné úlohy (jehož existenci budeme dokazovat v kapitole 3.3) lze odvodit odpovídající řešení úlohy trojrozměrné.

K tomu budeme potřebovat informace o postavení sféricky symetrických funkcí v prostoru $H^1(\Omega)$, a několik pomocných tvrzení.

Vlastnost 6. *Pro každou funkci $v \in L^1(\Omega)$ platí*

$$\int_{\Omega} v dx = \int_0^R \left(\int_{|x|=r} v dS \right) dr. \quad (3.31)$$

Vnitřní integrál na pravé straně je plošný integrál po povrchu koule se středem v bodě 0 a poloměru r .

Definice 2. 1. Je-li w funkce definovaná na intervalu $[0, R]$, označme Qw funkci definovanou na $\overline{\Omega}$ předpisem

$$(Qw)(x) = w(|x|). \quad (3.32)$$

2. Je-li $v \in C^1(\overline{\Omega})$, definujeme funkci Pv na intervalu $[0, R]$ předpisem

$$(Pv)(r) = \frac{1}{4\pi} \int_{|y|=1} v(ry) \, dS. \quad (3.33)$$

3. Definujeme

$$\begin{aligned} \mathcal{S} &= \{v \in C^1(\overline{\Omega}) : \text{Existuje } w \in C^1([0, R]) \text{ tak, že } v = Qw\}, \\ \mathcal{A} &= \{v \in C^1(\overline{\Omega}) : \int_{|x|=r} v \, dS = 0 \text{ pro každé } r \in (0, R)\}. \end{aligned}$$

Lemma 5 (Vlastnosti podprostoru \mathcal{S}).

1. Množina \mathcal{S} je podprostor $C^1(\overline{\Omega})$. Je-li $v_1, v_2 \in \mathcal{S}$, pak funkce $x \mapsto v_1(x)v_2(x)$ patří do \mathcal{S} .

2. Je-li $v \in \mathcal{S}$, potom²

$$\begin{aligned} \nabla v(x) &= \frac{x}{|x|} w_x(|x|), & x \in \Omega \setminus \{0\}, \\ \nabla v(0) &= 0. \end{aligned}$$

3. Funkce w z definice \mathcal{S} je určena jednoznačně. Je-li $w \in C^1([0, R])$, pak $Qw \in \mathcal{S}$, právě když

$$w_x(0) = 0. \quad (\text{derivace zprava v bodě } 0)$$

4. Je-li $v = Qw \in \mathcal{S}$, pak

$$\|v\|_{L^2(\Omega)}^2 = 4\pi \|w\|_U^2, \quad \|v\|_{H^1(\Omega)}^2 = 4\pi \|w\|_V^2.$$

Důkaz.

1. Plyne přímo z definice.

2. Pro $x \neq 0$

$$\nabla v(x) = \nabla w(|x|) = w_x(|x|) \nabla |x| = \frac{x}{|x|} w_x(|x|),$$

²Pro derivaci funkce jedné proměnné $w : (0, R) \rightarrow \mathbb{R}$ zde i v dalším textu používáme symbol w_x .

pro $x = 0$

$$\begin{aligned} \frac{\partial v}{\partial x_i}(0) &= \frac{1}{2} \lim_{h \rightarrow 0^+} \frac{v(0 + he_i) - v(0)}{h} + \frac{1}{2} \lim_{h \rightarrow 0^+} \frac{v(0 - he_i) - v(0)}{-h} = \\ &= \lim_{h \rightarrow 0^+} \frac{v(he_i) - v(-he_i)}{2h} = \lim_{h \rightarrow 0^+} \frac{w(h) - w(h)}{2h} = 0. \end{aligned}$$

3. Jednoznačnost je zřejmá. Je-li $v = Qw \in \mathcal{S}$, potom z předpokladu $w \in C^1([0, R])$ plyne

$$|w_x(0)| = \lim_{x \rightarrow 0} \left| \frac{x}{|x|} w_x(|x|) \right| = \lim_{x \rightarrow 0} |\nabla v(x)| = |\nabla v(0)| = 0.$$

Buď naopak $w_x(0) = 0$. Funkce $v = Qw$ je zřejmě pro každé $r > 0$ třídy

$$u \in C(\overline{\Omega}) \cap C^1(\overline{\Omega_{r,R}}), \quad \Omega_{r,R} = \{x \in \mathbb{R}^3 : r < |x| < R\}.$$

Stačí tedy dokázat, že $\nabla u(0)$ existuje a

$$\lim_{x \rightarrow 0} \nabla u(x) = \nabla u(0).$$

Pro $0 \neq |x| < R$ je

$$\nabla v(x) = \frac{x}{|x|} w_x(|x|), \quad \lim_{x \rightarrow 0} |\nabla u(x)| = \lim_{x \rightarrow 0} |w_x(|x|)| = 0$$

Je $v(0) = w(0)$, platí

$$\begin{aligned} |v(x) - v(0)| &= |w(|x|) - w(0)| \leq M(|x|)|x|, \\ M(r) &= \max_{0 < \rho < r} |w_x(\rho)|. \end{aligned} \tag{3.34}$$

Ze spojitosti w_x plyne $\lim_{r \rightarrow 0^+} M(r) = 0$, a podle (3.34) má tedy funkce v v bodě $x = 0$ nulový totální diferenciál.

4. Platí

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} v^2(x) \, dx &= \int_0^R w^2(r) \int_{|x|=r} dS \, dr = 4\pi \int_0^R r^2 w^2(r) \, dr, \\ \int_{\Omega} |\nabla v(x)|^2 \, dx &= \int_0^R w_x^2(r) \int_{|x|=r} \left| \frac{x}{|x|} \right| dS \, dr = 4\pi \int_0^R r^2 w_x^2(r) \, dr. \end{aligned}$$

□

Lemma 6 (Vlastnosti podprostoru \mathcal{A}). \mathcal{A} je podprostor $C^1(\overline{\Omega})$. Je-li $v \in \mathcal{A}$, pak pro každé $r \in (0, R)$ platí

$$\int_{|x|=r} x \cdot \nabla v(x) \, dS = 0. \quad (3.35)$$

Důkaz. Necht' $0 < r_1 < r_2 \leq R$. Funkce

$$J(r) = \int_{|y|=1} v(ry) \, dS(y), \quad r \in (r_1, r_2)$$

je nulová, protože substitucí $x = ry$ dostaneme

$$0 = \int_{|x|=r} v(x) \, dS(x) = \int_{|y|=1} v(ry) r^2 \, dS(y) = r^2 J(r).$$

Zaměníme limitu a integrál

$$\begin{aligned} 0 = J'(r) &= \lim_{h \rightarrow 0^+} \frac{J(r+h) - J(r)}{h} = \lim_{h \rightarrow 0^+} \int_{|y|=1} \frac{[v((r+h)y) - v(ry)]}{h} \, dS(y) \\ &= \int_{|y|=1} \lim_{h \rightarrow 0^+} \frac{[v(ry+hy) - v(ry)]}{h} \, dS(y) = \int_{|y|=1} y \cdot \nabla v(ry) \, dS(y) \\ &= \int_{|x|=r} \frac{x}{r} \cdot \nabla v(x) \cdot \frac{1}{r^2} \, dS(x) = \frac{1}{r^3} \int_{|x|=r} x \cdot \nabla v(x) \, dS(x). \end{aligned}$$

Majoranta

$$\left| \frac{[v(ry+hy) - v(ry)]}{h} \right| \leq \frac{|hy| \max_{x \in \Omega} |\nabla v(x)|}{h} \leq \max_{x \in \Omega} |\nabla v(x)|.$$

Meze r_1 a r_2 lze volit libovolně, takže (3.35) platí pro každé $r \in (0, R)$. \square

Lemma 7 (Vlastnosti zobrazení P). Pro každé $v \in C^1(\overline{\Omega})$ je $Pv \in C^1([0, R])$ a platí $(Pv)_x(0) = 0$. Je-li navíc $v \in \mathcal{S}$, pak $v = QPv$.

Důkaz. Pro $r \in [-R, R]$ definujeme

$$f(r) = \frac{1}{4\pi} \int_{|y|=1} v(ry) \, dS.$$

Derivujeme integrál podle parametru $r \in [-R, R]$

$$\frac{df(r)}{dr} = \frac{1}{4\pi} \int_{|y|=1} \frac{\partial v(ry)}{\partial r} \, dS = \frac{1}{4\pi} \int_{|y|=1} y \cdot \nabla v(ry) \, dS.$$

Integrand je omezen konečným číslem

$$M = \max_{x \in \Omega} |\nabla v(x)|,$$

z čehož plyne oprávněnost záměny integrálu a derivace a hladkost $f \in C^1([-R, R])$. Dosadíme $r = 0$

$$\frac{df}{dr}(0) = \frac{1}{4\pi} \int_{|y|=1} y \cdot \nabla v(0) \, dS = \frac{1}{4\pi} \underbrace{\left(\int_{|y|=1} y \, dS \right)}_{=0 \in \mathbb{R}^3} \cdot \nabla v(0) = 0.$$

Funkce Pv je restrikcí funkce f na interval $[0, R]$,

$$Pv \in C^1([0, R]), \quad (Pv)_x(0) = f'(0) = 0.$$

Za předpokladu $v \in \mathcal{S}$ je

$$(Pv)(r) = \frac{1}{4\pi} \int_{|y|=1} v(ry) \, dS = \frac{w(r)}{4\pi} \int_{|y|=1} dS = w(r).$$

Funkce w z definice \mathcal{S} je určena jednoznačně, takže nutně $v = QPv$. □

Lemma 8 (Ortogonalita \mathcal{S} a \mathcal{A}).

1. Je-li $v_S \in \mathcal{S}$ a $v_A \in \mathcal{A}$, pak

$$\int_{\Omega} v_S(x)v_A(x) \, dx = 0, \quad \int_{\Omega} \nabla v_S(x) \cdot \nabla v_A(x) \, dx = 0. \quad (3.36)$$

2. Ke každému $v \in C^1(\overline{\Omega})$ existuje právě jedna $v_S \in \mathcal{S}$, a právě jedna $v_A \in \mathcal{A}$ tak, že

$$v = v_A + v_S. \quad (3.37)$$

Přiřazení $v \rightarrow v_A$ a $v \rightarrow v_S$ jsou lineární operátory, omezené v normách prostorů $L^2(\Omega)$ i $H^1(\Omega)$.

Důkaz. 1. Je-li $v_A \in \mathcal{A}$, $v_S = Qw \in \mathcal{S}$, platí

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} v_S(x)v_A(x) \, dx &= \int_0^R v_S(r) \int_{|x|=r} v_A(x) \, dS \, dr = 0, \\ \int_{\Omega} \nabla v_S(x) \cdot \nabla v_A(x) \, dx &= \int_0^R \frac{w_x(r)}{r} \int_{|x|=r} x \cdot \nabla v_A(x) \, dS \, dr = 0. \end{aligned}$$

2. Necht' $v \in C^1(\overline{\Omega})$. Položíme

$$v_S = QPv, \quad v_A = v - v_S.$$

Protože $(Pv)_x(0) = 0$, je $v_S \in \mathcal{S}$. Také $v_A \in \mathcal{A}$, protože pro každé $r \in (0, R)$ platí

$$\begin{aligned} \int_{|x|=r} v_A(x) dS(x) &= \int_{|x|=r} v(x) dS(x) - \int_{|x|=r} v_S(x) dS(x) \\ &= r^2 \int_{|y|=1} v(ry) dS(y) - (Pv)(r) \int_{|x|=r} dS(x) \\ &= 4\pi r^2 \left(\frac{1}{4\pi} \int_{|y|=1} v(ry) dS(y) - (Pv)(r) \right) = 0. \end{aligned}$$

Jednoznačnost rozkladu i omezenost příslušných projekcí plyne z ortogonality (3.36). \square

Lemma 9. Necht' $w : [0, R] \rightarrow \mathbb{R}$ je měřitelná funkce. Potom je funkce Qw měřitelná.

Důkaz. Funkce $v(x) = (Qw)(x) = w(|x|)$ je složená funkce. Složení dvou měřitelných funkcí ovšem obecně měřitelná funkce být nemusí. Dále λ^1 resp. λ^3 značí jednorozměrnou resp. trojrozměrnou Lebesgueovu míru.

Necht' $A_1 \subseteq [0, R]$ je měřitelná množina. Z borelovské regularity Lebesgueovy míry plyne existence borelovských množiny E_1 a F_1 takových, že

$$E_1 \subseteq A_1 \subseteq F_1, \quad \lambda^1(E_1) = \lambda^1(A_1) = \lambda^1(F_1).$$

Zobrazení $x \mapsto |x|$ je spojitě, takže množinové vzory

$$E_3 = \{x \in \Omega : |x| \in E_1\}, \quad F_3 = \{x \in \Omega : |x| \in F_1\}$$

jsou měřitelné. Můžeme použít (3.31)

$$\lambda^3(F_3 \setminus E_3) = \int_{F_3 \setminus E_3} dx = \int_{F_1 \setminus E_1} r^2 dr = 0.$$

Množina

$$A_3 = \{x \in \Omega : |x| \in A_3\}$$

vyhovuje inkluzi

$$F_3 \setminus A_3 \subseteq F_3 \setminus E_3.$$

Přitom $F_3 \setminus E_3$ je měřitelná množina nulové míry, a Lebesgueova míra je úplná. Proto i množina A_3 je měřitelná.

Dokázali jsme, že vzor měřitelné množiny při zobrazení $x \mapsto |x|$ je měřitelná množina. Z předchozích úvah (s $E_1 = \emptyset$) je také zřejmé, že vzor nulové množiny při zobrazení $x \mapsto |x|$ je nulová množina.

Přejděme nyní k vlastnímu důkazu měřitelnosti funkce v . Funkce w je definovaná skoro všude v $[0, R]$. Podle předchozího je vzor doplňku definičního oboru funkce w nulová množina, takže i funkce v je definovaná skoro všude.

Je-li $A \subseteq [0, R]$ otevřená množina, potom je množina $w^{-1}(A)$ měřitelná. Z dokázaných vlastností funkce $|\cdot|$ plyne, že měřitelná je i množina

$$v^{-1}(A) = |\cdot|^{-1}(w^{-1}(A)). \quad \square$$

Lemma 10. *Nechť $w \in V$ a $v = Qw$. Potom $v \in H^1(\Omega)$ a funkce*

$$g_i(x) = \frac{w_x(|x|)}{|x|}x, \quad x \in \Omega, \quad i = 1, 2, 3.$$

je slabou parciální derivací funkce v podle proměnné x_i v Ω . Platí

$$\|v\|_{H^1(\Omega)}^2 = 4\pi \|w\|_V^2.$$

Důkaz. Podle předchozího lemmatu jsou funkce v a g_i měřitelné. Platí

$$\begin{aligned} \|v\|_{L^2(\Omega)}^2 &= \int_0^R w^2(r) \int_{|x|=r} dS \, dr = 4\pi \|w\|_U^2, \\ \sum_{i=1}^3 \|g_i\|_{L^2(\Omega)}^2 &= \int_0^R w_x^2(r) \int_{|x|=r} \sum_{i=1}^3 \frac{x_i^2}{|x|^2} dS \, dr = 4\pi \|w_x\|_U^2. \end{aligned}$$

Zbývá tedy ukázat, že funkce g_i jsou skutečně slabé derivace. Zvolme $\varphi \in C_0^\infty(\Omega)$ a $i = 1, 2, 3$. Funkce $x \mapsto g_i(x)\varphi(x)$ je integrovatelná na Ω , platí

$$\int_{\Omega} \varphi(x) g_i(x) \, dx = \int_0^R w_x(r) \underbrace{\left(\int_{|x|=r} \varphi(x) \frac{x_i}{|x|} dS \right)}_{\psi(r)} \, dr \quad (3.38)$$

Pro $r = |x|$ je $n_i = x_i/|x|$ i -tá složka jednotkového vektoru vnější normály k hranici koule $B_r = \{y : |y| < r\}$. Podle Gaussovy věty platí

$$\psi(r) = \int_{|x|<r} \frac{\partial \varphi(x)}{\partial x_i} \, dx = \int_0^r \left(\int_{|x|=\rho} \frac{\partial \varphi(x)}{\partial x_i} dS \right) d\rho, \quad 0 < r < R.$$

Vnitřní integrál

$$\eta(\rho) = \int_{|x|=\rho} \frac{\partial\varphi(x)}{\partial x_i} dS(x) = \rho^2 \int_{|y|=1} \frac{\partial\varphi(\rho y)}{\partial x_i} dS(y)$$

je zřejmě spojitá funkce na $[0, R]$. Funkce ψ je primitivní funkcí k η , je tedy třídy $C^1([0, R])$, platí

$$|\eta(r)| \leq Mr^2, \quad |\psi(r)| \leq Mr^3, \quad 0 \leq r \leq R, \quad M = 4\pi \max_{x \in \Omega} \left| \frac{\partial\varphi(x)}{\partial x_i} \right|.$$

Funkce w je absolutně spojitá na každém intervalu $[\delta, R]$. Podle věty o integraci per partes pro absolutně spojitě funkce platí

$$\int_{\delta}^R w_x(r)\psi(r) dr = [w(R)\psi(R) - w(\delta)\psi(\delta)] - \int_{\delta}^R w(r)\psi'(r) dr.$$

Z (3.25) plyne

$$\begin{aligned} |w(\delta)\psi(\delta)| &\leq MC\delta^{5/2} \|w\|_V \xrightarrow{\delta \rightarrow 0^+} 0, \\ \left| \int_0^{\delta} w_x(r)\psi(r) dr \right| &\leq M \int_0^{\delta} r^3 |w_x(r)| dr \leq \delta M \int_0^{\delta} r^2 |w_x(r)| dr \xrightarrow{\delta \rightarrow 0^+} 0, \\ \left| \int_0^{\delta} w(r)\psi'(r) dr \right| &\leq M \int_0^{\delta} r^2 |w(r)| dr \xrightarrow{\delta \rightarrow 0^+} 0. \end{aligned}$$

Funkce φ má kompaktní nosič v Ω , $\psi(R) = 0$. Proto

$$\begin{aligned} \int_0^R w_x(r)\psi(r) dr &= - \int_0^R w(r)\psi'(r) dr = - \int_0^R w(r)\eta(r) dr \\ &= - \int_0^R w(r) \int_{|x|=r} \frac{\partial\varphi(x)}{\partial x_i} dS dr = - \int_{\Omega} w(|x|) \frac{\partial\varphi(x)}{\partial x_i} dx. \end{aligned}$$

Z (3.38) potom

$$\int_{\Omega} \varphi(x)g_i(x) dx = - \int_{\Omega} v(x) \frac{\partial\varphi(x)}{\partial x_i} dx$$

a funkce g_i je tedy slabou parciální derivací funkce v podle proměnné x_i . □

Lemma 11. 1. Zobrazení Q je spojitý lineární operátor $U \rightarrow L^2(\Omega)$,

$$(v, Qw)_{L^2(\Omega)} = 4\pi (Pv, w)_U, \quad v \in C^1(\overline{\Omega}), w \in U.$$

2. Zobrazení Q je spojitý lineární operátor $V \rightarrow H^1(\Omega)$,

$$\begin{aligned} \nabla(Qw)(x) &= \frac{(Qw_x)(x)x}{|x|} && \text{pro s.v. } x \in \Omega, w \in V, \\ [v, Qw]_{H^1(\Omega)} &= 4\pi [Pv, w]_V, && v \in C^1(\overline{\Omega}), w \in V. \end{aligned}$$

3. Existuje spojitý lineární operátor $P^* : V^* \rightarrow [H^1(\Omega)]^*$ tak, že

$$\langle v, P^*w^* \rangle_{H^1(\Omega), [H^1(\Omega)]^*} = 4\pi \langle Pv, w^* \rangle_{V, V^*}, \quad v \in C^1(\overline{\Omega}), w^* \in V^*.$$

Důkaz. První a druhé tvrzení plynou z již dokázaných vlastností operátorů Q a P , prostorů \mathcal{S} a \mathcal{A} a rozkladu (3.37). Omezený lineární operátor P definovaný na hustém podprostoru $C^1(\Omega)$ lze rozšířit na spojitý lineární operátor

$$\overline{P} : H^1(\Omega) \rightarrow V.$$

Operátor P^* potom definujeme rovností

$$\langle v, P^*w^* \rangle_{H^1(\Omega), [H^1(\Omega)]^*} = 4\pi \langle \overline{P}v, w^* \rangle_{V, V^*} \quad v \in H^1(\Omega), w^* \in V^*. \quad \square$$

Lemma 12. Zobrazení $Q_T : W^{1,2}(0, T; U, V) \rightarrow W^{1,2}(0, T; L^2(\Omega), H^1(\Omega))$ definované předpisem

$$(Q_T u)(t) = Q(u(t)), \quad u \in W^{1,2}(0, T; U, V), t \in (0, T),$$

je spojitý lineární operátor. Platí

$$(Q_T u)'(t) = P^*(\dot{u}(t)) \quad \text{pro s.v. } t \in (0, T) \text{ v prostoru } [H^1(\Omega)]^*.$$

Důkaz. $Q : V \rightarrow H^1(\Omega)$ je spojitý lineární operátor a zobrazení $t \mapsto u(t)$ je bochnerovky měřitelné. Proto je také $t \mapsto Qu(t)$ bochnerovsky měřitelné. Platí

$$\begin{aligned} \int_0^T \|(Q_T u)(t)\|_{H^1(\Omega)}^2 dt &\leq \int_0^T C^2 \|u(t)\|_V^2 dt \leq C^2 \|u\|_{L^2(0, T; V)}^2, \\ Q_T u &\in L^2(0, T; H^1(\Omega)). \end{aligned}$$

Stejně tak funkce

$$g(t) = P^*(\dot{u}(t))$$

leží v prostoru $L^2(0, T; [H^1(\Omega)]^*)$. Zbývá ověřit definiční vlastnost derivace (3.13), tj. že pro každé $\varphi \in C_0^\infty(0, T)$ a každé $v \in H^1(\Omega)$ platí

$$-\int_0^T \varphi'(t) (v, (Q_T u)(t))_{L^2(\Omega)} dt = \int_0^T \varphi(t) \langle v, g(t) \rangle_{H^1(\Omega), [H^1(\Omega)]^*} dt. \quad (3.39)$$

Pro $v \in C^1(\Omega)$ je (3.39) ekvivalentní rovnostem

$$\begin{aligned} - \int_0^T \varphi'(t) (v, Q(u(t)))_{L^2(\Omega)} dt &= \int_0^T \varphi(t) \langle v, P^*(\dot{u}(t)) \rangle_{H^1(\Omega), [H^1(\Omega)]^*} dt, \\ -4\pi \int_0^T \varphi'(t) (Pv, u(t))_U dt &= 4\pi \int_0^T \varphi(t) \langle Pv, \dot{u}(t) \rangle_{V, V^*} dt, \\ - \int_0^T \varphi'(t) (w, u(t))_U dt &= \int_0^T \varphi(t) \langle w, \dot{u}(t) \rangle_{V, V^*} dt, \quad w = Pv. \end{aligned}$$

Protože $w = Pv \in C^1([0, R]) \subseteq V$, plyne platnost poslední rovnosti z předpokladu $u \in W^{1,2}(0, T; U, V)$. Z hustoty $C^1(\Omega)$ v $H^1(\Omega)$ plyne platnost (3.39) pro všechna $v \in H^1(\Omega)$. \square

Věta 3. *Nechť funkce u_i řeší úlohu (3.27)-(3.30). Potom předpis*

$$\begin{aligned} c_i^0(x) &= u_i^0(|x|), \quad x \in \Omega, \quad i = 1, \dots, L, \\ c_i(x, t) &= u_i(|x|, t), \quad (x, t) \in \Omega \times (0, T), \quad i = 1, \dots, L, \end{aligned} \quad (3.40)$$

definuje funkce třídy

$$\begin{aligned} c_i^0 &\in L^2(\Omega), \quad i = 1, \dots, L, \\ c_i &\in W^{1,2}(0, T; L^2(\Omega), H^1(\Omega)), \quad i = 1, \dots, L, \end{aligned} \quad (3.41)$$

a funkce c_i řeší úlohu (3.15)-(3.18) s počátečními podmínkami c_i^0 .

Důkaz. Je $c_i = Q_T u_i$, platnost (3.41) plyne z předchozího lemmatu. Pro s.v. $t \in (0, T)$, $i = 1, \dots, L$ a $v \in C^1(\overline{\Omega})$

$$\begin{aligned} \langle v, \dot{c}_i \rangle_{H^1(\Omega), [H^1(\Omega)]^*} &= 4\pi \langle Pv, \dot{u}_i \rangle_{V, V^*}, \\ (v, c_i)_{L^2(\Omega)} &= 4\pi (Pv, u_i)_U, \\ [v, c_i]_{H^1(\Omega)} &= 4\pi [Pv, u_i]_V, \\ \int_{\Omega} v c_i c_j dx &= \int_0^R (Pv) u_i u_j \int_{|x|=r} dS dr + \int_0^R u_i u_j \int_{|x|=r} \underbrace{(v - QPv)}_{\in \mathcal{A}} dS dr \\ &= 4\pi \int_0^R r^2 (Pv) u_i u_j dr. \end{aligned}$$

Pro $v \in C^1(\overline{\Omega})$ jsou tedy (3.29) a (3.17) ekvivalentní. Vzhledem ke spojitosti operátoru P (rozšířeného na celý prostor $H^1(\Omega)$) a vnoření $H^1(\Omega) \hookrightarrow L^6(\Omega)$ jsou obě strany obou rovnic (3.29) a (3.17) spojitě vzhledem k testovací funkci v . Platí tedy (3.17) pro každé $v \in H^1(\Omega)$, každé $i = 1, \dots, L$ a skoro všechna $t \in (0, T)$. \square

3.3 Existence řešení jednorozměrné úlohy

K důkazu existence řešení úlohy (3.27)-(3.30) použijeme Galerkinovu metodu. Galerkinova metoda vyžaduje odvození apriorního odhadu pro Galerkinovy aproximace v normě prostoru $W^{1,2}(0, T; U, V)$. V lineární případě (viz [28]) lze využít elipticity, v nelineárním případě monotonie a koercivity (viz [8]). Zavedeme dodatečné zjednodušující předpoklady, které koercivitu zaručí. Otázku, zda je možné dokázat existenci řešení Galerkinovou metodou pouze za předpokladů (3.1)-(3.4), zodpovědět neumíme.³

3.3.1 Zjednodušující předpoklady

Předpoklad 2.

1. *Nechť*

$$a_{ijk} = 0, \quad j \neq k, i, j, k = 1, \dots, L. \quad (3.42)$$

2. *Označme*

$$a_{ij} = a_{ijj}, \quad i, j = 1, \dots, L,$$

$$a_{ij}^+ = \begin{cases} a_{ij}, & i \neq j, \\ 0, & i = j, \end{cases} \quad i, j = 1, \dots, L.$$

Nechť je matice

$$A^+ = (a_{ij}^+)_{i,j=1}^L \quad (3.43)$$

ireducibilní.

Předpokládáme tedy, že soustava reakcí obsahuje pouze monomolekulové a rekombinační reakce. Ireducibilita znamená, že orientovaný graf, jehož vrcholy jsou reagující látky, a hrany vedou od reaktantů rekombinačních reakcí k produktům, je silně souvislý. O monomolekulových reakcích nepředpokládáme nic.

Pokud zanedbáme lineární členy a položíme $b_{ij} = 0$, lze předpoklad ireducibility matice A^+ vynechat a dokázat existenci postupně pro každou komponentu souvislosti jejího grafu.

³Speciálním případem soustavy parciálních diferenciálních rovnic popisující jednoduchou chemickou reakci $A + B \rightarrow C$ se zabývá [23]. Základním prostředkem jsou odhady tvaru

$$\sup_{t \in [0, T]} \|u(t)\|_{L^{p_1}} \leq \sup_{t \in [0, T]} \|f(t)\|_{L^{p_2}}$$

s vhodnými exponenty $p_1 > p_2$ pro řešení u lineární skalární rovnice

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \Delta u + f.$$

Nelineární členy se přesouvají do pravé strany a používá se apriorní odhad v L^1 -normě. Důkaz využívá speciálního tvaru soustavy chemických rovnic a nelze zobecnit na složitější soustavy.

V literatuře [19] lze také nalézt teorii nelineárních parabolických rovnic s klasickými derivacemi, hladkými počátečními podmínkami i řešením.

3.3.2 Modifikovaná soustava

Pro zjednodušení zápisu zavedeme další označení.

Definice 3. Definujeme prostor

$$\mathbf{V} = \underbrace{V \times \cdots \times V}_{L \times}$$

jehož prvky jsou L -tice funkcí $\mathbf{v} = (v_1, \dots, v_L)$, se skalárním součinem a normou

$$(\mathbf{v}, \mathbf{w})_{\mathbf{V}} = \sum_{i=1}^L (v_i, w_i)_V, \quad \|\mathbf{v}\|_{\mathbf{V}} = \left(\sum_{i=1}^L \|v_i\|_V^2 \right)^{\frac{1}{2}}.$$

Duál \mathbf{V}^* ztotožníme s prostorem

$$(\mathbf{V}^*)^L = \underbrace{V^* \times \cdots \times V^*}_{L \times}$$

definicí

$$\langle \mathbf{v}, \mathbf{f} \rangle_{\mathbf{V}, \mathbf{V}^*} = \sum_{i=1}^L \langle v_i, f_i \rangle_{V, V^*}.$$

Obdobně chápeme kartézské mocniny ostatních uvažovaných prostorů. Píšeme $\mathbf{v} \geq 0$, jestliže $v_i \geq 0$ pro všechna $i = 1, \dots, L$.

Existenci dokážeme nejprve pro upravenou soustavu, do níž vhodně doplníme absolutní hodnoty. Později dokážeme nezápornost řešení a budeme moci absolutní hodnoty opět odstranit.

Definice 4. Definujeme operátory

$$\begin{aligned} \mathbb{D}, \mathbb{A}, \mathbb{B}, \mathbb{G} : \mathbf{V} &\rightarrow \mathbf{V}^*, \\ \langle \mathbf{v}, \mathbb{D}\mathbf{u} \rangle_{\mathbf{V}, \mathbf{V}^*} &= \sum_{i=1}^L D_i [v_i, u_i]_V, \\ \langle \mathbf{v}, \mathbb{A}\mathbf{u} \rangle_{\mathbf{V}, \mathbf{V}^*} &= \sum_{i,j=1}^L a_{ij} \int_0^R x^2 v_i |u_j|_{i,j} |u_j| dx, \\ \langle \mathbf{v}, \mathbb{B}\mathbf{u} \rangle_{\mathbf{V}, \mathbf{V}^*} &= \sum_{i,j=1}^L b_{ij} \int_0^R x^2 v_i |u_j|_{i,j} dx, \\ \langle \mathbf{v}, \mathbb{G}\mathbf{u} \rangle_{\mathbf{V}, \mathbf{V}^*} &= \langle \mathbf{v}, -\mathbb{D}\mathbf{u} + \mathbb{A}\mathbf{u} + \mathbb{B}\mathbf{u} \rangle_{\mathbf{V}, \mathbf{V}^*}, \quad \mathbf{u}, \mathbf{v} \in \mathbf{V}, \end{aligned}$$

kde

$$\dagger z \dagger_{i,j} = \begin{cases} z & \text{pro } i = j, \\ |z| & \text{pro } i \neq j, \end{cases}$$

a lineární operátor

$$\mathbb{L} : \mathbf{V} \rightarrow \mathbf{V}, \quad \mathbb{L}\mathbf{v} = (\mu_1 v_1, \dots, \mu_L v_L), \quad \mathbf{v} \in \mathbf{V}.$$

Koeficienty $\mu_i > 0$ určíme dále.

Úloha 4. *Nechť platí předpoklady (3.1)-(3.4), (3.42)-(3.43) a je dáno*

$$\mathbf{u}^0 \in \mathbf{U}. \quad (3.44)$$

Hledáme $\mathbf{u} \in W^{1,2}(0, T; \mathbf{U}, \mathbf{V})$ splňující

$$\dot{\mathbf{u}}(t) = \mathbb{G}\mathbf{u}(t) \quad \text{pro s.v. } t \in (0, T) \quad (3.45)$$

a počáteční podmínku

$$\mathbf{u}(0) = \mathbf{u}^0. \quad (3.46)$$

Základem důkazu existence řešení je následující lemma, kde z předpokladů (3.42)-(3.43) odvodíme jistou vlastnost koercivity.

Lemma 13. *Za předpokladů (3.1)-(3.4) a (3.42)-(3.43) existují kladná čísla $\mu_i > 0$, $i = 1, \dots, L$ tak, že pro každé $\mathbf{u} \in \mathbf{V}$ platí*

$$\langle \mathbb{L}\mathbf{u}, \mathbb{A}\mathbf{u} \rangle_{\mathbf{V}, \mathbf{V}^*} \leq 0.$$

Důkaz. I. Nejprve nalezneme čísla $\mu_i > 0$ tak, aby

$$\sum_{i,j=1}^L \mu_i a_{ij} x_i \dagger x_j \dagger_{i,j} |x_j| \leq 0, \quad x \in \mathbb{R}^L. \quad (3.47)$$

Nechť je $x \in \mathbb{R}^L$ je libovolný vektor, $\mu_i, \sigma_i > 0$ zatím neurčité a $x_i = \sigma_i y_i$. Platí

$$\sum_{i,j=1}^L \mu_i a_{ij} x_i \dagger x_j \dagger_{i,j} |x_j| = \sum_{i,j=1}^L \mu_i \sigma_i \sigma_j^2 a_{ij} y_i \dagger y_j \dagger_{i,j} |y_j| = \sum_{i=1}^L \mu_i \sigma_i^3 a_{ii} |y_i|^3 + \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^L \mu_i \sigma_i a_{ij} \sigma_j^2 y_i |y_j|^2.$$

Z Youngovy nerovnosti plyne

$$|y_i| |y_j|^2 \leq \frac{1}{3} |y_i|^3 + \frac{2}{3} |y_j|^3.$$

Podle (3.2) je $a_{ij}^\dagger = a_{ij} = a_{ijj} \geq 0$, $i \neq j$,

$$\begin{aligned}
\sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^L \mu_i \sigma_i a_{ij} \sigma_j^2 y_i |y_j|^2 &\leq \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^L \mu_i \sigma_i a_{ij} \sigma_j^2 \left(\frac{1}{3} |y_i|^3 + \frac{2}{3} |y_j|^3 \right) \\
&= \frac{1}{3} \sum_{i=1}^L \mu_i \sigma_i |y_i|^3 \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^L a_{ij} \sigma_j^2 + \frac{2}{3} \sum_{j=1}^L \sigma_j^2 |y_j|^3 \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^L \mu_i \sigma_i a_{ij} \\
&= \sum_{i=1}^L \left(\frac{1}{3} \mu_i \sigma_i \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^L a_{ij} \sigma_j^2 + \frac{2}{3} \sigma_i^2 \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^L \mu_j \sigma_j a_{ji} \right) |y_i|^3 \\
&= \sum_{i=1}^L \left(\frac{1}{3} \mu_i \sigma_i \sum_{j=1}^L a_{ij}^+ \sigma_j^2 + \frac{2}{3} \sigma_i^2 \sum_{j=1}^L \mu_j \sigma_j a_{ji}^+ \right) |y_i|^3.
\end{aligned}$$

Z ireducibility A^+ a (3.3) plyne $a_{ii} < 0$. Definujeme matici $Z \in \mathbb{R}^{L \times L}$ s prvky

$$z_{ij} = \frac{\mathbf{m}_i a_{ij}^+}{\mathbf{m}_j |a_{jj}|}, \quad i, j = 1, \dots, L.$$

Pro $e = (1, \dots, 1)^T$ a každé $j = 1, \dots, L$ platí

$$\begin{aligned}
(e^T Z)_j &= \sum_{i=1}^L z_{ij} = \frac{1}{\mathbf{m}_j |a_{jj}|} \sum_{i=1}^L \mathbf{m}_i a_{ij}^+ \\
&= \frac{1}{\mathbf{m}_j |a_{jj}|} \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^L \mathbf{m}_i a_{ij} = \frac{1}{\mathbf{m}_j |a_{jj}|} \left(\underbrace{\sum_{i=1}^L \mathbf{m}_i a_{ij} - \mathbf{m}_j a_{jj}}_{=0} \right) = -\frac{\mathbf{m}_j a_{jj}}{\mathbf{m}_j |a_{jj}|} = 1.
\end{aligned}$$

Spektrální poloměr matice Z^T a tedy také spektrální poloměr matice Z je roven 1 (třeba z Geršgorinovy věty, $z_{ii} = 0$). Matice Z je nezáporná a ireducibilní, existuje (podle Perron-Frobeniovy věty) kladný vlastní vektor $g \in \mathbb{R}^L$ příslušný vlastnímu číslu 1, tj.

$$\sum_{j=1}^L z_{ij} g_j = g_i, \quad i = 1, \dots, L.$$

Tedy

$$\sum_{j=1}^L a_{ij}^+ \frac{g_j}{\mathbf{m}_j |a_{jj}|} = \frac{g_i}{\mathbf{m}_i}, \quad \sum_{j=1}^L a_{ji}^+ \mathbf{m}_j = \mathbf{m}_i |a_{ii}|, \quad i = 1, \dots, L.$$

Čísla σ_i a μ_i zvolíme tak, aby

$$\sigma_j^2 = \frac{g_j}{\mathbf{m}_j |a_{jj}|}, \quad \mu_j \sigma_j = \mathbf{m}_j, \quad j = 1, \dots, L,$$

tj.

$$\sigma_j = g_j^{1/2} \mathbf{m}_j^{-1/2} |a_{jj}|^{-1/2}, \quad \mu_j = \mathbf{m}_j^{3/2} |a_{jj}|^{1/2} g_j^{-1/2}.$$

Potom

$$\sum_{j=1}^L a_{ij}^+ \sigma_j^2 = \frac{g_i}{\mathbf{m}_i}, \quad \sum_{j=1}^L \mu_j \sigma_j a_{ji}^+ = \mathbf{m}_i |a_{ii}|$$

a platí

$$\begin{aligned} \frac{1}{3} \mu_i \sigma_i \sum_{j=1}^L a_{ij}^+ \sigma_j^2 + \frac{2}{3} \sigma_i^2 \sum_{j=1}^L \mu_j \sigma_j a_{ji}^+ &= \frac{1}{3} \mathbf{m}_i \cdot \frac{g_i}{\mathbf{m}_i} + \frac{2}{3} \frac{g_i}{\mathbf{m}_i |a_{ii}|} \cdot \mathbf{m}_i |a_{ii}| = g_i, \\ \mu_i \sigma_i^3 a_{ii} &= -\mu_i \sigma_i \cdot \sigma_i^2 \cdot |a_{ii}| = -\mathbf{m}_i \cdot \frac{g_i}{\mathbf{m}_i |a_{ii}|} \cdot |a_{ii}| = -g_i. \end{aligned}$$

Tím je odhad odhad (3.47) dokázán:

$$\sum_{i,j=1}^L \mu_i a_{ij} x_i \dagger x_j \dagger |x_j| \leq \sum_{i=1}^L (-g_i) |y_i|^3 + \sum_{i=1}^L g_i |y_i|^3 = 0.$$

II. Pro každé $\mathbf{u} \in \mathbf{V}$ platí

$$\begin{aligned} \langle \mathbb{L}\mathbf{u}, \mathbb{A}\mathbf{u} \rangle_{\mathbf{V}, \mathbf{V}^*} &= \sum_{i,j=1}^L a_{ij} \int_0^R \xi^2 (\mu_i u_i) \dagger u_j \dagger |u_j| \, d\xi \\ &= \int_0^R \xi^2 \left(\sum_{i,j=1}^L \mu_i a_{ij} u_i \dagger u_j \dagger |u_j| \right) \, d\xi \leq 0. \quad \square \end{aligned}$$

Kladné koeficienty μ_i umožňují používat výraz $(\mathbb{L}v, v)_{\mathbf{U}}$ resp. $(\mathbb{L}v, v)_{\mathbf{V}}$ místo normy $\|v\|_{\mathbf{U}}$ resp. $\|v\|_{\mathbf{V}}$.

Lemma 14. *Existují čísla $C_{AB} \geq 0, C_{AD} > 0, c_\mu, C_\mu > 0$ tak, že pro všechna $\mathbf{v} \in \mathbf{V}$ platí*

$$\begin{aligned} \langle \mathbb{L}\mathbf{v}, \mathbb{B}\mathbf{v} \rangle_{\mathbf{V}, \mathbf{V}^*} &\leq C_{AB} (\mathbb{L}\mathbf{v}, \mathbf{v})_{\mathbf{U}}, \quad -\langle \mathbb{L}\mathbf{v}, \mathbb{D}\mathbf{v} \rangle_{\mathbf{V}, \mathbf{V}^*} \leq -C_{AD} [\mathbb{L}\mathbf{v}, \mathbf{v}]_{\mathbf{V}}, \\ c_\mu (\mathbf{v}, \mathbf{v})_{\mathbf{U}} &\leq (\mathbb{L}\mathbf{v}, \mathbf{v})_{\mathbf{U}} \leq C_\mu (\mathbf{v}, \mathbf{v})_{\mathbf{U}}, \\ c_\mu [\mathbf{v}, \mathbf{v}]_{\mathbf{V}} &\leq [\mathbb{L}\mathbf{v}, \mathbf{v}]_{\mathbf{V}} \leq C_\mu [\mathbf{v}, \mathbf{v}]_{\mathbf{V}}. \end{aligned}$$

Důkaz. Plyne okamžitě z definice operátoru \mathbb{L} a nezápornosti čísel μ_i . □

3.3.3 Galerkinova metoda

Důkaz existence řešení lineární skalární rovnice pomocí Galerkinovy metody, který je uveden např. v [28], lze už s pomocí lemmatu 13 bez problémů upravit pro případ úlohy (3.44)-(3.46). Jen stručně zde uvedeme postup.

Zvolíme skalární bázové funkce

$$\omega^n \in V, \quad n = 1, 2, \dots$$

s vlastnostmi

1. ω^n jsou ortonormální v $(\cdot, \cdot)_U$ a ortogonální v $[\cdot, \cdot]_V$,
2. $\{\omega^n : n = 1, 2, \dots\}$ je hustá podmnožina U ,
3. $\{\omega^n : n = 1, 2, \dots\}$ je hustá podmnožina V .

Zavedeme systém konečně dimenzionálních podprostorů $\mathbf{Y}^N \subset \mathbf{V}$,

$$\begin{aligned} \mathbf{Y}^N &= \text{Lin}\{\omega_i^n : n = 1, \dots, N, i = 1, \dots, L\}, \\ \omega_i^n &= (0, \dots, 0, \omega^n, 0, \dots, 0). \end{aligned}$$

Definujeme N -tou galerkinovskou aproximaci

$$\mathbf{u}^N : [0, T_N] \rightarrow \mathbf{Y}^N$$

jako maximální řešení počáteční úlohy

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{v}, \dot{\mathbf{u}}^N \rangle_{\mathbf{V}, \mathbf{V}^*} &= \langle \mathbf{v}, \mathbb{G}\mathbf{u}^N \rangle_{\mathbf{V}, \mathbf{V}^*}, & \mathbf{v} \in \mathbf{Y}^N, t \in [0, T_N), \\ \mathbf{u}^N(0) &= P^N \mathbf{u}^0, \end{aligned} \tag{3.48}$$

kde $P^N : \mathbf{U} \rightarrow \mathbf{Y}^N$ je $(\cdot, \cdot)_U$ -ortogonální projekce. Počáteční úloha (3.48) je ekvivalentní počáteční úloze pro soustavu obyčejných diferenciálních rovnic pro koeficienty $y_i^{N,n}$ v rozvoji

$$\mathbf{u}^N(t) = \sum_{i=1}^L \sum_{n=1}^N y_i^{N,n}(t) \omega_i^n.$$

Pravá strana soustavy je zřejmě v $y_i^{N,n}$ polynom nejvýše druhého stupně, s na čase nezávislými koeficienty. Úloha (3.48) má tedy jednoznačné řešení třídy

$$\mathbf{u}^N \in C^1([0, T_N]; \mathbf{Y}^N).$$

Z (3.48), lemmat 13 a 14 plyne „energetický“ odhad

$$\sup_{0 \leq t \leq \tilde{T}} (\mathbb{L}\mathbf{u}^N, \mathbf{u}^N)_U + \int_0^{\tilde{T}} [\mathbb{L}\mathbf{u}^N, \mathbf{u}^N]_V dt \leq C (\mathbb{L}P^N \mathbf{u}^0, P^N \mathbf{u}^0)_U,$$

$$\|\mathbf{u}^N\|_{L^\infty(0,\tilde{T};\mathbf{U})} + \|\mathbf{u}^N\|_{L^2(0,\tilde{T};\mathbf{V})} \leq C \|\mathbf{u}^0\|_{\mathbf{U}},$$

$$\tilde{T} < T_N, \quad N = 1, 2, \dots$$

Z omezenosti řešení (3.48) plyne $T_N = +\infty$, Galerkinova aproximace existuje na celém intervalu $[0, T]$. Pomocí ortogonalit ω^n a vět o vnoření lze odvodit také odhad časové derivace (druhá mocnina normy má původ v nelineárním členu)

$$\|\dot{\mathbf{u}}^N\|_{L^2(0,T;\mathbf{V}^*)} \leq C \|\mathbf{u}^0\|_{\mathbf{U}}^2, \quad N = 1, 2, \dots$$

Posloupnost \mathbf{u}^N je omezená v reflexivním prostoru $W^{1,2}(0, T; \mathbf{U}, \mathbf{V})$, má slabě konvergentní podposloupnost. S využitím kompaktního vnoření

$$W^{1,2}(0, T; U, V) \hookrightarrow L^2(0, T; U)$$

a lokální lipschitzovskosti nelineárních členů (viz důkaz lemmatu 1 na str. 28) lze dokázat, že slabá limita je hledaným řešením úlohy (3.44)-(3.46).

3.3.4 Nezápornost

Nezápornost řešení ověříme testováním (3.48) zápornou částí řešení (viz [22]).

Lemma 15.

1. *Nechť $v \in V$. Potom záporná část v^- funkce v ,*

$$v^-(x) = \begin{cases} v(x) & v(x) < 0, \\ 0 & v(x) \geq 0, \end{cases} \quad (3.49)$$

je také funkce z prostoru V . Platí

$$v_x^-(x) = \begin{cases} v_x(x) & v(x) < 0, \\ 0 & v(x) \geq 0. \end{cases} \quad (3.50)$$

2. *Nechť $w \in W^{1,2}(0, T; U, V)$. Potom*

$$2 \int_s^t \langle w^-(\tau), \dot{w}(\tau) \rangle_{V, V^*} d\tau = \int_{\{w(t)<0\}} x^2 w^2(x, t) dx - \int_{\{w(s)<0\}} x^2 w^2(x, s) dx \quad (3.51)$$

kde

$$\{v < 0\} = \{x \in [0, R] : v(x) < 0\}, \quad v \in V.$$

Důkaz. I. Pravé strany (3.49) a (3.50) jsou zřejmě funkce z prostoru U . K dokončení důkazu prvního tvrzení lemmatu stačí ukázat, že (3.50) je skutečně slabou derivací funkce v^- . V knize [6] je uvedena následující vlastnost Sobolevových prostorů:

Je-li $F : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ lipschitzovská funkce a $u \in W^{1,p}(G)$, $1 \leq p \leq \infty$, $G \subset \mathbb{R}^n$, potom složená funkce $F(u)$ leží v prostoru $W^{1,p}(G)$ a platí

$$\nabla F(u(x)) = \begin{cases} F'(u(x))\nabla u(x), & \text{pokud } F' \text{ je diferencovatelná v } u(x) \\ 0, & \text{jinak} \end{cases}$$

pro skoro všechna $x \in G$.

Speciálně, tato vlastnost platí pro složenou funkci $F(u)$, kde $F(y) = y^-$ a vnitřní funkce u je z prostoru $H^1(r, R)$. Vzhledem k vnoření $V \hookrightarrow H^1(r, R)$, $0 < r < R$, je tedy skutečně (3.50) slabou derivací funkce v^- pro každé $v \in V$.

II. Pro $\varepsilon > 0$ definujme (srov. [22])

$$F_\varepsilon(y) = \begin{cases} -(\varepsilon^2 + y^2)^{\frac{1}{2}} + \varepsilon & y < 0, \\ 0 & y \geq 0, \end{cases}$$

$$G(y) = \int_0^y F_\varepsilon(\eta) d\eta, \quad y \in \mathbb{R}.$$

Zřejmě $F_\varepsilon, G_\varepsilon \in C^1(\mathbb{R})$,

$$|F_\varepsilon(y)| \leq |y|, \quad |F_\varepsilon(y) - F_\varepsilon(z)| \leq |y - z|, \quad |F'_\varepsilon(y)| \leq 1.$$

Pro každé $v \in V$ je $F(v) \in V$, pro každé $v \in U$ platí $G(v) \in L^1_{x^2}$. Je-li

$$w \in C^1([0, T]; C^1([0, R])),$$

potom

$$\begin{aligned} \int_s^t \langle F_\varepsilon(w(\tau)), \dot{w}(\tau) \rangle_{V, V^*} d\tau &= \int_s^t \int_0^R x^2 F_\varepsilon(w(x, \tau)) \dot{w}(x, \tau) dx d\tau \\ &= \int_s^t \frac{d}{d\tau} \left(\int_0^R x^2 G_\varepsilon(w(x, \tau)) dx \right) d\tau = \int_0^R x^2 G_\varepsilon(w(x, t)) dx - \int_0^R x^2 G_\varepsilon(w(x, s)) dx. \end{aligned} \tag{3.52}$$

III. Necht' $w \in W^{1,2}(0, T; U, V)$. Existuje posloupnost funkcí

$$w^n \in C^1([0, T]; C^1([0, R])), \quad n \in \mathbb{N},$$

tak, že $w^n \rightarrow w$ v prostoru $W^{1,2}(0, T; U, V)$. Speciálně $w^n \rightarrow w$ v Lebesguově prostoru

$$L^2_{x^2}((0, R) \times (0, T)) = \left\{ v : \int_0^T \int_0^R x^2 v^2(x, t) dx < \infty \right\}.$$

Z konvergence v L^p -normě plyne existence vybrané posloupnosti, která konverguje skoro všude. Lze tedy volit w^n tak, aby

$$w^n(x, t) \rightarrow w(x, t), \quad \text{pro s.v. } (x, t) \in (0, T) \times (0, R).$$

Rovnost (3.52) platí pro funkce w^n . Provedeme limitní přechod $w^n \rightarrow w$ na obou stranách (3.52) s pevným $\varepsilon > 0$. Na levé straně

$$\begin{aligned} & \left| \int_s^t \langle F_\varepsilon(w^n(\tau)), \dot{w}^n(\tau) \rangle_{V, V^*} d\tau - \int_s^t \langle F_\varepsilon(w(\tau)), \dot{w}(\tau) \rangle_{V, V^*} d\tau \right| \\ & \leq \|F_\varepsilon(w^n) - F_\varepsilon(w)\|_{L^2(0, T; V)} \|\dot{w}^n\|_{L^2(0, T; V^*)} + \|F_\varepsilon(w)\|_{L^2(0, T; V)} \|\dot{w}^n - \dot{w}\|_{L^2(0, T; V^*)}, \end{aligned}$$

vynecháváme argumenty (x, t)

$$\begin{aligned} & \|F_\varepsilon(w^n) - F_\varepsilon(w)\|_{L^2(0, T; V)}^2 \\ & \leq \int_0^T \int_0^R x^2 \left\{ |F_\varepsilon(w^n) - F_\varepsilon(w)|^2 + |F'_\varepsilon(w^n)w_x^n - F'_\varepsilon(w)w_x|^2 \right\} dx dt \\ & \leq \int_0^T \int_0^R x^2 |w^n - w|^2 dx dt + 2 \int_0^T \int_0^R x^2 |F'_\varepsilon(w^n)|^2 |w_x^n - w_x|^2 dx dt \\ & \quad + 2 \int_0^T \int_0^R x^2 |F'_\varepsilon(w^n) - F'_\varepsilon(w)|^2 |w_x|^2 dx dt. \quad (3.53) \end{aligned}$$

Protože $F'_\varepsilon(w^n) \rightarrow F'_\varepsilon(w)$ s.v. a integrand posledního členu v (3.53) lze majorizovat

$$|F'_\varepsilon(w^n) - F'_\varepsilon(w)|^2 |w_x|^2 \leq 2 \left(\sup_{y \in \mathbb{R}} F'_\varepsilon(y) \right) |w_x|^2,$$

konverguje poslední člen (3.53) k nule. Konvergence ostatních členů je zřejmá.

Na pravé straně (3.52)

$$|G_\varepsilon(y) - G_\varepsilon(z)| \leq \left| \int_y^z |\eta| d\eta \right| = \frac{1}{2} |y|y| - x|x| \leq (|x| + |y|) |x - y|,$$

$$\begin{aligned}
& \left| \int_0^R x^2 G_\varepsilon(w(x, t)) dx - \int_0^R x^2 G_\varepsilon(w^n(x, t)) dx \right| \\
& \leq \int_0^R x^2 (|w(x, t)| + |w^n(x, t)|) |w(x, t) - w^n(x, t)| dx \leq \\
& \leq (\|w(t)\|_U + \|w^n(t)\|_U) \|w(t) - w^n(t)\|_U \rightarrow 0,
\end{aligned}$$

z vnoření $W^{1,2}(0, T; U, V) \hookrightarrow C([0, T]; U)$.

IV. Rovnost (3.52) tedy platí pro všechna $w \in W^{1,2}(0, T; U, V)$ a všechna $\varepsilon > 0$. Provedeme limitní přechod $\varepsilon \rightarrow 0+$ při pevném w . Platí

$$\begin{aligned}
F_\varepsilon(w(x, t)) &\rightarrow w^-(x, t), & F'_\varepsilon(w(x, t))w_x(x, t) &\rightarrow w_x^-(x, t), \\
G_\varepsilon(w(x, t)) &\rightarrow \frac{1}{2} [w^-(x, t)]^2
\end{aligned}$$

pro s.v. $(x, t) \in (0, R) \times (0, T)$. Z toho plyne

$$\begin{aligned}
& \|F_\varepsilon(w) - w^-\|_{L^2(0, T; V)} \rightarrow 0, \\
& \int_0^R x^2 G(w(x, t)) dx \rightarrow \frac{1}{2} \int_0^R x^2 [w^-(x, t)]^2 dx = \frac{1}{2} \int_{\{w(t)<0\}} x^2 w^2(x, t) dx
\end{aligned}$$

a (3.51) je dokázáno. \square

Lemma 16. *Nechť platí předpoklady (3.1)-(3.4), (3.42)-(3.43) a $0 \leq \mathbf{u}^0 \in \mathbf{U}$. Potom je řešení úlohy (3.44)-(3.46) nezáporné, tj. pro s.v. $x \in [0, R]$, všechna $t \in [0, R]$ a všechna $i = 1, \dots, L$ platí*

$$u_i(x, t) \geq 0.$$

Důkaz. Pro s.v. $t \in (0, T)$, $i = 1, \dots, L$, $v_i = u_i^-(t)$ platí

$$\begin{aligned}
& -D_i [v_i, u_i]_V = -D_i \int_{\{u_i < 0\}} x^2 (u_i)_x^2 dx \leq 0, \\
& a_{ii} \int_0^R x^2 v_i \uparrow u_i \downarrow_{i,i} |u_i| dx = -|a_{ii}| \int_{\{u_i < 0\}} x^2 u_i^2 |u_i| dx \leq 0, \\
& a_{ij} \int_0^R x^2 v_i \uparrow u_j \downarrow_{i,j} |u_j| dx = |a_{ij}| \int_{\{u_i < 0\}} x^2 u_i |u_j|^2 dx \leq 0, \quad i \neq j = 1, \dots, L \\
& b_{ii} \int_0^R x^2 v_i \uparrow u_i \downarrow_{i,i} dx = -|b_{ii}| \int_{\{u_i < 0\}} x^2 u_i^2 dx \leq 0,
\end{aligned}$$

$$b_{ij} \int_0^R x^2 v_i |u_j|_{i,j} dx = |b_{ij}| \int_{\{u_i < 0\}} x^2 u_i |u_j| dx \leq 0, \quad i \neq j = 1, \dots, L.$$

Z (3.45) dosazením $v = (0, \dots, 0, v_i, 0, \dots, 0)$ a integrací přes časový interval plyne

$$\int_0^s \langle u_i^-, \dot{u}_i \rangle_{V, V^*} dt \leq 0, \quad 0 \leq s \leq T.$$

Proto

$$0 \leq \int_{\{u_i(s) < 0\}} x^2 u_i^2(x, s) dx \leq \int_{\{u_i(0) < 0\}} x^2 u_i^2(x, 0) dx = 0,$$

$u(x, s) = 0$ pro s.v $x \in [0, R]$ a všechna $s \in [0, T]$. □

3.3.5 Existenční věta

V předchozích odstavcích jsme za předpokladů (3.42)-(3.43) dokázali existenci řešení modifikované úlohy (3.44)-(3.46). Řešení je nezáporné, takže je také řešením původní jedno-rozměrné úlohy (3.27)-(3.30). Řešení úlohy (3.27)-(3.30) je jednoznačné (v důsledku vět 2, 3).

Věta 4. *Za předpokladů (3.42)-(3.43) má úloha (3.27)-(3.30) právě jedno řešení. Toto řešení je nezáporné.*

3.4 Eliptická regularita

V této části uvedeme další vlastnosti studované úlohy, potřebné pro vyšetřování numerického řešení. Týkají se regularity řešení lineárních úloh v prostoru V a jsou pouze přenesením faktů známých o eliptických rovnicích na oblastech s hladkou hranicí v \mathbb{R}^3 . Vlastnost, kterou uvádíme jako Lemma 18, je pro jiné okrajové podmínky uvedena bez formálního důkazu v [25].

Definice 5. Nechť $H_{x^2}^2$ je množina všech funkcí $u \in V$, jejichž druhá distributivní derivace u_{xx} leží také v prostoru U . Používáme normu

$$\|u\|_{H_{x^2}^2} = \left(\|u\|_V^2 + \int_0^R x^2 u_{xx}^2(x) dx \right)^{\frac{1}{2}}, \quad u \in H_{x^2}^2. \quad (3.54)$$

Vlastnosti prostoru $H_{x^2}^2$ jsou analogické vlastnostem prostoru $H^2(\Omega)$.

Vlastnost 7. 1. *Prostor $H_{x^2}^2$ je separabilní Banachův prostor, $C^\infty([0, R])$ tvoří hustou podmnožinu prostoru $H_{x^2}^2$.*

2. Platí $H_{x^2}^2 \hookrightarrow C([0, R])$,

$$\max_{x \in [0, R]} |u(x)| \leq C \|u\|_V^{\frac{1}{2}} \|u\|_{H_{x^2}^2}^{\frac{1}{2}}, \quad u \in H_{x^2}^2.$$

Důkaz. První tvrzení viz [10]. Druhé tvrzení plyne z vnoření

$$V \hookrightarrow L^2(0, R), \quad H_{x^2}^2 \hookrightarrow H^1(0, R) \hookrightarrow C([0, R])$$

a nerovnosti (3.24). □

Lemma 17. *Zobrazení P (srov. (3.33), str. 36) definované předpisem*

$$(Pv)(r) = \frac{1}{4\pi} \int_{|y|=1} v(ry) \, dS, \quad v \in C(\overline{\Omega}),$$

je spojitý lineární operátor $P : H^2(\Omega) \rightarrow H_{x^2}^2$.

Důkaz. V důsledku vnoření $H^2(\Omega) \hookrightarrow C(\overline{\Omega})$ je Pv definováno pro každé $v \in H^2(\Omega)$. Pro $v \in C^2(\overline{\Omega})$ platí

$$(Pv)_{xx}(r) = \frac{d^2}{dr^2} \frac{1}{4\pi} \int_{|y|=1} v(ry) \, dS = \frac{1}{4\pi} \int_{|y|=1} y^T A(ry) y \, d\sigma(y),$$

kde $A(x)$ je Hessova matice funkce v v bodě x ,

$$A_{ij}(x) = \frac{\partial^2 v(x)}{\partial x_i \partial x_j}, \quad x \in \Omega.$$

Využijeme ekvivalenci spektrální a Frobeniovy maticové normy (platí s konstantou 1) a Hölderovu nerovnost

$$\begin{aligned} |(Pv)_{xx}(r)| &\leq \frac{1}{4\pi} \int_{|y|=1} \|A(ry)\|_2 \, dS \leq \frac{1}{\sqrt{4\pi r^2}} \left(\int_{|x|=r} \|A(x)\|_F^2 \, dS \right)^{\frac{1}{2}}, \\ \int_0^R x^2 |(Pv)_{xx}|^2 \, dx &\leq \int_0^R r^2 \frac{1}{4\pi r^2} \int_{|x|=r} \|A(x)\|_F^2 \, dS \, dr = \frac{1}{4\pi} \int_{\Omega} \|A(x)\|_F^2 \, dx \\ &= \frac{1}{4\pi} \int_{\Omega} \sum_{i,j=1}^3 \left(\frac{\partial^2 v(x)}{\partial x_i \partial x_j} \right)^2 \, dx = \frac{1}{4\pi} \|v\|_{H^2(\Omega)}^2. \end{aligned}$$

$C^2(\overline{\Omega})$ je hustá podmnožina $H^2(\Omega)$, tedy $\|Pv\|_{H_{x^2}^2} \leq C \|v\|_{H^2(\Omega)}$ pro každé $v \in H^2(\Omega)$. □

Vlastnost 8. Pro každé $f \in L^2(\Omega)$ existuje právě jedno $u_f \in H^1(\Omega)$ tak, že

$$\int_{\Omega} \nabla u_f \cdot \nabla v \, dx + \int_{\Omega} u_f v \, dx = \int_{\Omega} f v \, dx, \quad v \in H^1(\Omega). \quad (3.55)$$

Navíc $u_f \in H^2(\Omega)$ a

$$\|u_f\|_{H^2(\Omega)} \leq C \|f\|_{L^2(\Omega)}.$$

Důkaz. Jedná se o eliptickou úlohu s hladkými koeficienty na oblasti s hladkou hranicí. Viz [15]. \square

Odvodíme jednorozměrnou verzi uvedené vlastnosti.

Lemma 18. Pro každé $f \in U$ existuje právě jedno $u_f \in V$ tak, že

$$[u_f, v]_V + (u_f, v)_U = (f, v)_U, \quad v \in V. \quad (3.56)$$

Navíc $u_f \in H_{x_2}^2$ a

$$\|u_f\|_{H_{x_2}^2} \leq C \|f\|_U.$$

Důkaz. Existence $u_f \in V$ je zřejmá, levá strana (3.56) je spojitá a V -eliptická bilineární forma. Platí

$$[v, Qu_f]_{H^1(\Omega)} + (v, Qu_f)_{L^2(\Omega)} = (Qu_f, Qf)_{L^2(\Omega)}, \quad v \in V,$$

což je (3.55) s Qu_f a Qf místo u_f a f . Protože $Qf \in U$, je $Qu \in H^2(\Omega)$,

$$\|u_f\|_{H_{x_2}^2} = \|PQu_f\|_{H_{x_2}^2} \leq C \|Qu_f\|_{H^2(\Omega)} \leq C \|Qf\|_{L^2(\Omega)} \leq C \|f\|_U. \quad \square$$

Kapitola 4

Numerické řešení

Jednorozměrnou úlohu (3.27)-(3.30) budeme řešit přibližně Galerkinovou metodou semi-diskretizace v prostoru. Vycházíme z knihy [25], která se zabývá Galerkinovou metodou pro lineární i nelineární úlohy na oblastech v \mathbb{R}^n , i speciálními případy diskretizace lineární singulární úlohy

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{2}{x} \frac{\partial u}{\partial x} + q(x)u &= f(x), & x \in (0, 1), t \geq 0, \\ \frac{\partial u}{\partial x}(0, t) = u(1, t) &= 0 & t \geq 0, \\ u(x, 0) &= v(x) & x \in (0, 1), \end{aligned}$$

kteřá je v jedné z možných slabých formulací až na nelineární členy a okrajové podmínky shodná s jednou rovnicí naší jednorozměrné soustavy (3.27)-(3.30).

Formálně je Galerkinova metoda v této kapitole totožná s (3.48) z části 3.3. Tam jsme Galerkinovu metodu použili k důkazu existence řešení úlohy (3.27)-(3.30). Ukázali jsme, že za dodatečných předpokladů lze z posloupnosti Galerkinových aproximací vybrat podposloupnost, jejíž slabá limita je hledané řešení. Jednotlivé aproximace samostatný význam neměly.

V této kapitole využijeme existence a vlastností řešení (3.27)-(3.30) k sestavení jiného systému Galerkinových aproximací. Jednotlivé aproximace budeme schopni realizovat na počítači. Ukážeme, jak rychle se blíží k přesnému řešení. Budeme je moci použít jako přibližná řešení, tedy jako náhrádky řešení úlohy (3.27)-(3.30), a tím také řešení trojrozměrné úlohy (3.15)-(3.18), při studiu vlastností fyzikálního problému, popsáno v kapitole 2.

Začneme nejprve definicí přibližného řešení. Diskrétní prostor V_h budeme specifikovat později.

4.1 Semidiskretizace v prostoru

Zvolíme konečně rozměrný prostor V_h pro diskrétní řešení

$$V_h = \text{Lin}\{\varphi_0, \dots, \varphi_{M-1}\} \subset\subset V, \quad \dim V_h = M \quad (4.1)$$

Diskrétní řešení u_i^h hledáme jako funkce definované na časovém intervalu $[0, T]$ s hodnotami v prostoru V_h .

$$u_i^h : [0, T] \rightarrow V_h, \quad i = 1, \dots, L.$$

Dosazením těchto funkcí do (3.29) a testováním funkcemi z V_h dojdeme k diskrétní úloze.

Úloha 5. *Hledáme funkce*

$$u_i^h \in C^1([0, T]; V_h), \quad i = 1, \dots, L, \quad (4.2)$$

splňující

$$(v^h, \dot{u}_i^h)_U = -D_i [v^h, u_i^h]_V + \int_0^R x^2 v^h \left(\sum_{j,k=1}^L a_{ijk} u_j^h u_k^h + \sum_{j=1}^L b_{ij} u_j^h \right) dx, \quad (4.3)$$

$$t \in (0, T), \quad v^h \in V_h,$$

$$u_i^h(0) = u_i^{h;0}, \quad (4.4)$$

$i = 1, \dots, L$, kde $u_i^{h;0} \in V_h$ jsou vhodné diskrétní počáteční podmínky.

Funkce u_i^h jsou lineární kombinace bázevých funkcí,

$$u_i^h(t) = \sum_{\mu=0}^{M-1} y_{i\mu}(t) \varphi_\mu. \quad (4.5)$$

Řešení úlohy (4.3),(4.4) je ekvivalentní nalezení funkcí

$$y_{i\mu} \in C^1([0, T]; \mathbb{R}), \quad i = 1, \dots, L, \quad \mu = 0, \dots, M-1,$$

které řeší soustavu obyčejných diferenciálních rovnic

$$\sum_{\mu=0}^{M-1} g_{m\mu}^0 \dot{y}_{i\mu} = -D_i \sum_{\mu=0}^{M-1} g_{m\mu}^1 y_{i\mu} + \sum_{j,k=1}^L a_{ijk} \sum_{\mu,\nu=0}^{M-1} f_{m\mu\nu} y_{j\mu} y_{k\nu} + \sum_{j=1}^L b_{ij} \sum_{\mu=0}^{M-1} g_{m\mu}^0 y_{j\mu}, \quad (4.6)$$

$$i = 1, \dots, L, \quad m = 0, \dots, M-1,$$

kde

$$\begin{aligned} g_{\mu\nu}^0 &= (\varphi_\mu, \varphi_\nu)_U, & \mu, \nu &= 0, \dots, M-1, \\ g_{\mu\nu}^1 &= [\varphi_\mu, \varphi_\nu]_V, & \mu, \nu &= 0, \dots, M-1, \\ f_{m\mu\nu} &= \int_0^R x^2 \varphi_m \varphi_\nu \varphi_\mu dx, & m, \mu, \nu &= 0, \dots, M-1, \end{aligned} \quad (4.7)$$

s počátečními podmínkami $y_{i\nu}^0$,

$$u_i^{h;0} = \sum_{\nu=0}^{M-1} y_{i\nu}^0 \varphi_\nu.$$

V terminologii metody konečných prvků je $\mathbf{G}_0 = (g_{\mu\nu}^0)_{\mu,\nu=0}^{M-1}$ *matice hmoty* a $\mathbf{G}_1 = (g_{\mu\nu}^1)_{\mu,\nu=0}^{M-1}$ *matice tuhosti*. Matice \mathbf{G}_0 je Grammova matice systému lineárně nezávislých funkcí φ_μ . Je pozitivně definitní, soustavu (4.6) lze rozřešit vzhledem k první derivaci a převést na tvar

$$\dot{\mathbf{y}} = \mathcal{F}(\mathbf{y}),$$

s nekonečně hladkou pravou stranou \mathcal{F} . Soustava tedy má jednoznačné a nekonečně hladké maximální řešení.

Zatím nemůžeme říci, zda definiční obor řešení obsahuje celý požadovaný interval $[0, T]$. Obráťme se nejprve k volbě diskrétního prostoru V_h .

4.2 Diskrétní prostor V_h

Za diskrétní prostor V_h bereme prostor po částech lineárních funkcí, zadaných hodnotami v M uzlech

$$0 = x_0 < x_1 < \dots < x_{M-1} = R. \quad (4.8)$$

Označíme

$$\begin{aligned} h_\mu &= x_{\mu+1} - x_\mu, & \mu &= 0, 1, \dots, M-2, \\ h &= \max_{\mu=0, \dots, M-2} h_\mu. \end{aligned}$$

Definujeme

$$V_h = \{v^h \in C([0, R]) : v^h \text{ je lineární na } [x_\mu, x_{\mu+1}], \mu = 0, \dots, M-2\}$$

a jeho bázi $\{\varphi_\mu\}_{\mu=0}^M$,

$$\varphi_\mu \in V_h, \quad \varphi_\mu(x_\nu) = \delta_{\mu\nu}, \quad \mu, \nu = 0, 1, \dots, M-1. \quad (4.9)$$

Prostor V_h je M -rozměrným podprostorem prostoru V . Jedná se o prostor lineárních konečných prvků nad jednorozměrným intervalem.

Dále odvodíme některé teoretické výsledky typické pro teorii konečných prvků, ovšem vždy vzhledem k normám s vahou $x \mapsto x^2$. Váha působí jistě obtíže v blízkosti bodu 0 a zhoršuje vlastnosti matic tuhosti \mathbf{G}_0 a hmoty \mathbf{G}_1 .

Důvody těchto potíží budou zřejmé, pokud si úlohu (4.2)-(4.4) představíme jako semi-diskretizaci třírozměrné úlohy (3.15)-(3.18) pomocí bázových funkcí speciálního typu

$$\tilde{\varphi}_\mu(x) = \varphi_\mu(|x|), \quad x \in \Omega, \mu = 0, 1, \dots, M-1.$$

Nosič funkce $\tilde{\varphi}_\mu$ je mezikruží s vnitřním poloměrem x_μ a vnějším poloměrem $x_{\mu+1} = x_\mu + h_\mu$. Trojrozměrná míra $\text{supp } \tilde{\varphi}_0$ je zřejmě řádu h^3 , míra $\text{supp } \tilde{\varphi}_M$ je řádu h . Báze je na první pohled „nevyvážená,” i při rovnoměrné síti ($h_\mu = h = R/(M-1)$). Jakékoliv pokusy o „vyvážení” by ovšem vedly k nepřijatelnému omezení volby uzlů (4.8). V [25] se uvádí (pro lineární úlohu a rovnoměrnou síť), že numerické řešení vykazuje poměrně velkou chybu v blízkosti bodu 0, a doporučuje slabou formulaci s jinou vahou $x \mapsto x$. Váha potom klesá k nule pomaleji, ale slabá formulace odpovídající eliptické úlohy není symetrická.

Postoupíme k odvození potřebných vlastností diskrétního prostoru V_h . Budeme předpokládat

$$\frac{h}{\min_{\mu=0,\dots,M-2} h_\mu} \leq C. \quad (4.10)$$

Pokud říkáme, že nějaká veličina *nezávisí na diskretizaci*, myslíme tím že nezávisí na počtu ani konkrétní volbě uzlů (4.8), splňujících (4.10). Veličina ovšem může záviset na datech úlohy, tedy na koeficientech a_{ijk} , b_{ij} , D_i a počáteční podmínce, nebo přesném řešení. Není-li řečeno jinak, označuje písmeno C v různých výrazech různé konstanty nezávislé diskretizaci. Pokud chceme zdůraznit, že nějaká veličina na diskretizaci závisí, píšeme k jejímu symbolu horní index h .

Budeme vyšetřovat asymptotické chování diskrétní úlohy pro malá h . Zápís

$$\lim_{h \rightarrow 0} f^h = f$$

chápeme takto: Pro každé $\varepsilon > 0$ existuje $\delta > 0$ takové, že při libovolném počtu a volbě uzlů (4.8) splňujících (4.10) a nerovnost

$$h = \max_{\mu=0,\dots,M-2} h_\mu = \max_{\mu=0,\dots,M-2} (x_{\mu+1} - x_\mu) < \delta$$

je symbol f^h definován, $f^h \in \mathbb{R}$ a platí

$$|f^h - f| < \varepsilon.$$

Obdobně zápís

$$\limsup_{h \rightarrow 0} f^h = f$$

znamená, že pro každé $\varepsilon > 0$ existuje $\delta > 0$ takové, že při libovolném počtu a volbě uzlů (4.8) splňujících $h < \delta$ a (4.10) je symbol f^h definován, $f^h \in \mathbb{R}$ a platí $f^h < f + \varepsilon$. Definujeme

$$\begin{array}{lll} f^h = \mathcal{O}(h^p) & \text{jestliže} & \limsup_{h \rightarrow 0} \frac{1}{h^p} f^h < \infty, \\ f^h = o(h^p) & \text{jestliže} & \lim_{h \rightarrow 0} \frac{1}{h^p} f^h = 0. \end{array}$$

4.2.1 Lagrangeovská interpolace

Definice 6. Pro každé $v \in H_{x^2}^2$ definujeme $\Pi^h v \in V_h$ rovnicemi

$$(\Pi^h v)(x_\mu) = v(x_\mu), \quad \mu = 0, \dots, M-1.$$

V důsledku vnoření $H_{x^2}^2 \hookrightarrow C([0, R])$ je definice korektní. Odvodíme odhad chyby interpolace.

Vlastnost 9. Existuje $C > 0$ tak, že pro každou funkci

$$u \in H^2(a, b), \quad u(a) = u(b) = 0,$$

platí

$$\int_a^b u^2(x) dx \leq C(b-a)^4 \int_a^b u_{xx}^2(x) dx. \quad (4.11)$$

Lemma 19.

$$\|\Pi^h u - u\|_U \leq Ch^2 \|u\|_{H_{x^2}^2}, \quad u \in H_{x^2}^2.$$

Důkaz. Označme

$$e = \Pi^h u - u, \quad d_\mu = \frac{u(x_{\mu+1}) - u(x_\mu)}{h_\mu}, \quad \mu = 0, 1, \dots, M-2.$$

Pro $x \in [x_\mu, x_{\mu+1}]$, $\mu = 0, 1, \dots, M-2$, platí

$$\begin{aligned} e(x) &= \frac{x_{\mu+1} - x}{h_\mu} u(x_\mu) + \frac{x - x_\mu}{h_\mu} u(x_{\mu+1}) - u(x), \\ e_x(x) &= d_\mu - u_x(x), \\ e_{xx}(x) &= -u_{xx}(x). \end{aligned}$$

Vzhledem k vnoření $H_{x^2}^2 \hookrightarrow H^1(0, R)$ platí

$$d_\mu^2 = h_\mu^{-2} |u(x_{\mu+1}) - u(x_\mu)|^2 = h_\mu^{-2} \left(\int_{x_\mu}^{x_{\mu+1}} u_x(x) dx \right)^2 \leq h_\mu^{-1} \int_{x_\mu}^{x_{\mu+1}} u_x^2(x) dx.$$

Príspevek normy chyby na intervalu $[x_\mu, x_{\mu+1}]$ odhadneme pomocí (4.11). Platí totiž $xe|_{[x_\mu, x_{\mu+1}]} \in H^2(x_\mu, x_{\mu+1})$,

$$\int_{x_\mu}^{x_{\mu+1}} x^2 e^2(x) dx = \int_{x_\mu}^{x_{\mu+1}} [xe(x)]^2 dx \leq C(x_{\mu+1} - x_\mu)^4 \int_{x_\mu}^{x_{\mu+1}} [(xe(x))_{xx}]^2 dx$$

$$= Ch_\mu^4 \int_{x_\mu}^{x_{\mu+1}} [d_\mu - xu_{xx}(x) - u_x(x)]^2 dx \leq Ch_\mu^4 \int_{x_\mu}^{x_{\mu+1}} x^2 (u_{xx}^2 + u_x^2) dx.$$

Sečteme a využijeme vnoření $H_{x^2}^2 \hookrightarrow H^1(0, R)$,

$$\|e\|_U^2 = \sum_{\mu=0}^{M-2} \int_{x_\mu}^{x_{\mu+1}} x^2 e^2(x) dx \leq Ch^4 \sum_{\mu=0}^{M-2} \int_{x_\mu}^{x_{\mu+1}} x^2 (u_{xx}^2 + u_x^2) dx \leq Ch^4 \|u\|_{H_{x^2}^2}^2. \quad \square$$

Při odhadu chyby v normě $\|\cdot\|_V$ využijeme následující variantu Poincarého nerovnosti

Vlastnost 10. *Nechť $u \in V$, $0 \leq a < b \leq R$. Potom*

$$\int_a^b x^2 u^2 dx \leq \frac{(b-a)^2}{\pi^2} \int_a^b x^2 u_x^2 dx + \frac{3}{b^3 - a^3} \left| \int_a^b x^2 u dx \right|^2. \quad (4.12)$$

Důkaz. V článku [20] je dokázána platnost

$$\int_0^L p(y) u^2(y) dy \leq \frac{L^2}{\pi^2} \int_0^L p(y) [u'(y)]^2 dy + \frac{1}{\int_0^L p(y) dy} \left[\int_0^L p(y) u(y) dy \right]^2$$

pro každé $L > 0$, každou nezápornou konvexní funkci p a každou po částech hladkou funkci u . Nerovnost (4.12) je zřejmým důsledkem. \square

Lemma 20. *Nechť $u \in V$, $0 \leq a < b \leq R$. Nechť*

$$\int_a^b u(x) dx = 0.$$

Potom

$$\int_a^b x^2 u^2(x) dx \leq C(b-a)^2 \int_a^b x^2 u_x^2(x) dx. \quad (4.13)$$

Důkaz. Položme

$$\alpha = \frac{1}{b-a} \int_a^b x^2 dx, \quad g(x) = \int_a^x (s^2 - \alpha) ds.$$

Vyjádříme analyticky α a g ,

$$\alpha = \frac{1}{3} \cdot \frac{b^3 - a^3}{b-a} = \frac{b^2 + ab + a^2}{3},$$

$$g(x) = \frac{x^3 - a^3}{3} - \alpha(x - a) = \frac{(a + x + b)(x - a)(x - b)}{3},$$

$$|g(x)| = \frac{a + b + x}{3}(b - x)(x - a) \leq b(b - a)x.$$

Platí $g(a) = g(b) = 0$, integrujeme per partes a použijeme Hölderovu nerovnost

$$\int_a^b x^2 u(x) dx = \int_a^b (x^2 - \alpha) u(x) dx = - \int_a^b g(x) u_x(x) dx,$$

$$\left| \int_a^b x^2 u(x) dx \right| \leq b(b - a) \int_a^b x u_x(x) dx,$$

$$\left| \int_a^b x^2 u(x) dx \right|^2 \leq b^2(b - a)^3 \int_a^b x^2 u_x^2(x) dx.$$

aplikujeme (4.12),

$$\int_a^b x^2 u^2(x) dx \leq \frac{(b - a)^2}{\pi^2} \int_a^b x^2 u_x^2(x) dx + \frac{3}{b^3 - a^3} \cdot b^2(b - a)^3 \int_a^b x^2 u_x^2(x) dx$$

$$= (b - a)^2 \left[\pi^{-2} + 3 \frac{b^2}{b^2 + ab + a^2} \right] \int_a^b x^2 u_x^2(x) dx \leq 4(b - a)^2 \int_a^b x^2 u_x^2(x) dx. \quad \square$$

Lemma 21.

$$|\Pi^h u - u|_V \leq Ch \|u\|_{H_{x^2}^2}, \quad u \in H_{x^2}^2.$$

Důkaz. Označme $e = \Pi^h u - u$. Necht' $\mu = 0, 1, \dots, M - 2$. Platí

$$\int_{x_\mu}^{x_{\mu+1}} e_x(x) dx = h_\mu \cdot \frac{u(x_{\mu+1}) - u(x_\mu)}{h_\mu} - \int_{x_\mu}^{x_{\mu+1}} u_x(x) dx = 0.$$

Podle předchozího lemmatu

$$\int_{x_\mu}^{x_{\mu+1}} x^2 e_x^2(x) dx \leq Ch_\mu^2 \int_{x_\mu}^{x_{\mu+1}} x^2 e_{xx}^2(x) dx,$$

po sečtení přes $\mu = 0, 1, \dots, M - 2$

$$\int_0^R x^2 e_x^2(x) dx \leq Ch^2 \int_0^R x^2 e_{xx}^2(x) dx. \quad \square$$

4.2.2 Další projekce a jejich vlastnosti

Budeme používat ještě projekce ortogonální ve skalárních součinech $(\cdot, \cdot)_U$ resp. $(\cdot, \cdot)_V$. Projekci ortogonální v $(\cdot, \cdot)_V$ budeme používat namísto eliptické (Ritzovy) projekce. Bilineární forma $[\cdot, \cdot]_V$ není V -eliptická. Z těchto technických důvodů přidáváme do (4.14) člen $(v^h, R^h u - u)_U$.

Definice 7. Eliptickou projekci $R^h : V \rightarrow V_h$ a L^2 -ortogonální projekci $P^h : U \rightarrow V_h$ definujeme rovnicemi

$$[v^h, R^h u - u]_V + (v^h, R^h u - u)_U = 0, \quad v^h \in V_h, \quad (4.14)$$

$$(v^h, P^h u - u)_U = 0, \quad v^h \in V_h. \quad (4.15)$$

Lemma 22.

$$\|R^h u - u\|_V \leq \|u\|_V, \quad \|R^h u - u\|_U \leq Ch \|u\|_V, \quad u \in V, \quad (4.16)$$

$$\|R^h u - u\|_V \leq Ch \|u\|_{H_{x^2}^2}, \quad \|R^h u - u\|_U \leq Ch^2 \|u\|_{H_{x^2}^2}, \quad u \in H_{x^2}^2. \quad (4.17)$$

Důkaz. Nerovnosti v levém sloupci lze dokázat standardním postupem z ortogonality a využitím vlastností projekce Π^h . Zbylé nerovnosti plynou z lemmatu 18, str. 57 o eliptické regularitě prostřednictvím duálního vyjádření normy prostoru U . \square

Lemma 23. Pro každé $u \in U$ platí

$$P^h u = \sum_{\mu=0}^{M-1} z_\mu(u) \varphi_\mu, \quad (4.18)$$

kde

$$\begin{aligned} z(u) &= \mathbf{G}_0^{-1} y(u) \in \mathbb{R}^M, & \mathbf{G}_0 &= (g_{\mu\nu}^0)_{\mu,\nu=0}^{M-1} \in \mathbb{R}^{M \times M}, \\ y_\mu(u) &= (u, \varphi_\mu)_U = \langle \varphi_\mu, u \rangle_{V;V^*}, & \mu &= 0, \dots, M-1. \end{aligned}$$

Pomocí těchto vzorců lze $P^h u$ definovat i pro $u \in V^*$. Platí

$$(v^h, P^h u)_U = \langle v^h, u \rangle_{V;V^*}, \quad v^h \in V_h, \quad u \in V^*. \quad (4.19)$$

Důkaz. Platnost (4.18) ověříme násobením bázeovými funkcemi

$$\left(\varphi_\nu, \sum_{\mu=0}^{M-1} z_\mu(u) \varphi_\mu \right)_U = \sum_{\mu=0}^{M-1} z_\mu(u) (\varphi_\nu, \varphi_\mu)_U = \sum_{\mu=0}^{M-1} g_{\nu\mu}^0 z_\mu(u) = y_\nu(u) = \langle \varphi_\nu, u \rangle_{V;V^*}$$

a porovnáním s definicí (4.15). Rozšíření na V^* je možné, protože $\varphi_\mu \in V$. \square

4.2.3 Inverzní nerovnost

Lemma 24.

$$\|v^h\|_V \leq Ch^{-1} \|v^h\|_U, \quad v^h \in V_h. \quad (4.20)$$

Důkaz. Postup důkazu je modifikací techniky převodu na referenční element, využívající speciálního tvaru váhy $x \mapsto x^2$. Uvažujme prostor lineárních funkcí definovaných na intervalu $[0, 1]$,

$$\mathfrak{L} = \{s \in [0, 1] \mapsto \alpha s + \beta : \alpha, \beta \in \mathbb{R}\}.$$

Z ekvivalence norem na konečněrozměrném prostoru \mathfrak{L} plyne existence konstant $C_j > 0$, $j = 0, 1, 2$ takových, že

$$\left(\int_0^1 s^j \left| \frac{d}{ds} \ell(s) \right|^2 ds \right)^{\frac{1}{2}} \leq C_j \left(\int_0^1 s^j |\ell(s)|^2 ds \right)^{\frac{1}{2}}, \quad \ell \in \mathfrak{L}, \quad j = 0, 1, 2.$$

Proto

$$\begin{aligned} \int_{x_\mu}^{x_{\mu+1}} x^2 |v_x^h(x)|^2 dx &= h_\mu \int_0^1 (x_\mu + h_\mu s)^2 |v_x^h(x_\mu + h_\mu s)|^2 ds \\ &= \sum_{j=0}^2 \binom{2}{j} x_\mu^{2-j} h_\mu^{j-1} \int_0^1 s^j \left| \frac{d}{ds} v^h(x_\mu + h_\mu s) \right|^2 ds \\ &\leq \sum_{j=0}^2 \binom{2}{j} x_\mu^{2-j} h_\mu^{j-1} C_j^2 \int_0^1 s^j |v^h(x_\mu + h_\mu s)|^2 ds \leq Ch_\mu^{-2} \int_{x_\mu}^{x_{\mu+1}} x^2 |v_x^h(x)|^2 dx. \end{aligned} \quad (4.21)$$

Nerovnost (4.20) dostaneme sečtením (4.21) přes $\mu = 0, 1, \dots, M-2$ a využitím (4.10). \square

4.3 Globální existence diskrétního řešení, odhad chyby

Rovnice (4.6) je počáteční úloha pro soustavu obyčejných nelineárních autonomních rovnic s hladkou pravou stranou. Nelineární soustavy obecně nemají globální řešení. V části 3.3 jsme ukázali, že globální existenci a apriorní odhady norem Galerkinovských aproximací lze odvodit za dodatečných předpokladů (3.42)-(3.43) o koeficientech a_{ijk} a b_{ij} . Zde budeme postupovat jiným způsobem. Budeme předpokládat existenci dostatečně regulárního přesného řešení a dokazovat současně existenci diskrétního řešení i odhad chyby.

Předpoklad 3. *Nechť*

$$\mathbf{u}^0 \in \mathbf{L}^\infty(0, R) \quad (4.22)$$

a úloha (3.27)-(3.30) s počáteční podmínkou \mathbf{u}^0 má řešení

$$\mathbf{u} \in W^{1,2}(0, T; \mathbf{U}, \mathbf{V})$$

s dodatečnými vlastnostmi

$$\mathbf{u} \in L^\infty(0, T; \mathbf{L}^\infty(0, R)) \cap C^1((0, T]; \mathbf{V}), \quad (4.23)$$

$$\|\mathbf{u}(t)\|_{\mathbf{V}} \leq Ct^{-\frac{1}{2}}, \quad t \in (0, T], \quad (4.24)$$

$$\int_0^T t^2 \|\dot{\mathbf{u}}(t)\|_{\mathbf{V}}^2 dt < \infty. \quad (4.25)$$

Poznamenejme, že předpoklad (4.22) je poněkud umělý. O počátečním stavu fyzikální soustavy mnoho nevíme. Nelze očekávat spolehlivé vstupní údaje o počátečním rozložení koncentrace látek, kromě celkového množství jednotlivých radikálů a nějaké informace o velikosti clusteru. Z tohoto pohledu se L^∞ -norma zdá být příliš silná. Při skutečném numerickém výpočtu je ovšem těžko představitelná „obecnější“ počáteční podmínka než po částech spojitá funkce. Ve škále Lebesgueových a Sobolevových prostorů je potom volba prostoru L^∞ přirozená.

Předpoklady (4.23)-(4.25) jsou odvozeny z vlastností slabého řešení homogenní lineární skalární úlohy

$$\begin{aligned} \frac{\partial v}{\partial t} &= D\Delta v, \quad (x, t) \in \Omega \times (0, T), \\ v(x, 0) &= v^0(x), \quad x \in \Omega. \end{aligned} \quad (4.26)$$

s počáteční podmínkou $v^0 \in L^\infty(\Omega)$. Lze ukázat, že pokud řešení naší nelineární úlohy (3.27)-(3.30) s počáteční podmínkou třídy L^∞ existuje a je třídy $W^{1,2}(0, T; U, V)$, potom splňuje (4.23)-(4.25).

Kniha [25] uvádí pro galerkinovskou semidiskretizaci homogenní úlohy (4.26) s počáteční podmínkou $v^0 \in L^2(\Omega)$ pomocí konečných prvků řádu $p = 1, 2, \dots$ odhad chyby

$$\|v^h(t) - v(t)\|_{L^2(\Omega)} \leq Ch^r t^{-\frac{r}{2}}, \quad t > 0, \quad r = 1, 2, \dots, p+1. \quad (4.27)$$

Pravá strana (4.27) roste nade všechny meze pro $t \rightarrow 0+$. Avšak zvolíme-li pevně $0 < t_1 < t_2$, potom nerovnost zaručuje, že chyba má pro $t \in [t_1, t_2]$ optimální řád $\mathcal{O}(h^{p+1})$ v L^2 -normě.

Využijeme důkazové techniky z [25], [11] pro odvození analogického odhadu pro nelineární soustavu. Vyjdeme tedy z vlastností operátoru diskrétního řešení homogenní lineární úlohy.

4.3.1 Operátor řešení homogenní úlohy

Vlastnost 11. *Nechť $D > 0$. Počáteční úloha*

$$\begin{aligned} (v^h, \dot{z}^h)_U + D [v^h, z^h]_V &= 0, \quad v^h \in V_h, \quad z^h(t) \in V_h, \quad t \in (0, T), \\ z^h(0) &= P^h \varphi, \end{aligned} \quad (4.28)$$

má pro každé $\varphi \in V^*$ právě jedno řešení. Operátorová funkce Z_D^h definovaná rovnicí

$$Z_D^h(t)\varphi = z^h(t), \quad \varphi \in V^*, t \in (0, T),$$

je třídy

$$Z_D^h \in C^\infty([0, T]; \mathcal{L}(V^*, V_h)),$$

kde $\mathcal{L}(V^*, V_h)$ je prostor všech spojitých lineárních operátorů z V^* do V_h . Pro každé $\varphi \in V^*$ a $g \in L^2(0, T; V^*)$ má počáteční úloha

$$\begin{aligned} (v^h, \dot{z}^h)_U + D[v^h, z^h]_V &= \langle v^h, g \rangle_{V, V^*}, \quad v^h \in V_h, t \in (0, T), \\ z^h(0) &= P^h\varphi, \end{aligned} \quad (4.29)$$

právě jedno řešení, které lze psát ve tvaru

$$z^h(t) = Z_D^h(t)\varphi + \int_0^t Z_D^h(t-s)g(s)ds, \quad t \in (0, T). \quad (4.30)$$

Důkaz. Plyne z ekvivalence (4.28) a homogenní lineární soustavy obyčejných diferenciálních rovnic s konstantními koeficienty. \square

Lemma 25. Pro každé $D > 0$ a $T > 0$ existuje $C_{D,T} > 0$ nezávislé na diskretizaci tak, že pro každé $\varphi \in V^*$ a $t \in (0, T]$ platí

$$\|Z_D^h(t)\varphi\|_U \leq \|P^h\varphi\|_U, \quad |Z_D^h(t)\varphi|_V \leq |P^h\varphi|_V, \quad (4.31)$$

$$\|Z_D^h(t)\varphi\|_V \leq C_D t^{-\frac{1}{2}} \|P^h\varphi\|_U, \quad \|Z_D^h(t)\varphi\|_U \leq C_D t^{-\frac{1}{2}} \|\varphi\|_{V^*}, \quad (4.32)$$

$$\|\dot{Z}_D^h(t)\varphi\|_U \leq C_D t^{-1} \|P^h\varphi\|_U, \quad \int_0^T t \|\dot{Z}_D^h(t)\varphi\|_U^2 dt \leq C_D \|P^h\varphi\|_U^2. \quad (4.33)$$

Důkaz. Nerovnosti (4.31) odvodíme dosazením $v^h = z^h(t)$ resp. $v^h = \dot{z}^h(t)$ do (4.28).

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|z^h(t)\|_U^2 &= -D \|z^h\|_V^2 \leq 0, & \|z^h(t)\|_U &\leq \|z^h(0)\|_U = \|P^h\varphi\|_U, \\ \frac{D}{2} \frac{d}{dt} |z^h(t)|_V^2 &= -\|\dot{z}^h\|_U^2 \leq 0, & |z^h(t)|_V &\leq |z^h(0)|_V = |P^h\varphi|_V. \end{aligned}$$

Nerovnosti (4.32) odvodíme dosazením $v^h = \dot{z}^h(t)$, vynásobením t a integrací per partes

$$\begin{aligned} \frac{D}{2} t |z^h(t)|_V^2 - \frac{D}{2} \int_0^t |z^h(s)|_V^2 ds &= \int_0^t s \frac{D}{2} \frac{d}{ds} |z^h(s)|_V^2 ds \leq 0, \\ |z^h(t)|_V^2 &\leq \frac{1}{t} \int_0^t |z^h(s)|_V^2 ds = \frac{1}{2Dt} \int_0^t \frac{d}{ds} \|z^h(s)\|_U^2 ds \leq \frac{1}{2Dt} \|z^h(t)\|_U^2, \end{aligned}$$

$$\|z^h(t)\|_V^2 = \|z^h(t)\|_U^2 + |z^h(t)|_V^2 \leq Ct^{-1} \|z^h(0)\|_U^2, \quad t \in (0, T].$$

a využitím (4.19)

$$\begin{aligned} (v, Z_D^h(t) \varphi)_U &= (v, Z_D^h(t) P^h \varphi)_U = (Z_D^h(t) v, P^h \varphi)_U \\ &= \langle Z_D^h(t) v, \varphi \rangle_{V, V^*} \leq \|Z_D^h(t) v\|_V \|\varphi\|_{V^*} \leq Ct^{-\frac{1}{2}} \|v\|_V \|\varphi\|_{V^*}, \end{aligned}$$

protože pro každé $t \geq 0$ je restrikce $Z_D^h(t)$ na U samoadjungovaný operátor vzhledem ke skalárnímu součinu $(\cdot, \cdot)_U$.

Homogenní rovnici (4.28) splňuje také derivace $\dot{z}^h(t)$. Podle (4.31) je norma $\|\dot{z}^h(t)\|_U$ nerostoucí funkce proměnné t . Nerovnosti (4.33) jsou důsledky odhadu

$$\begin{aligned} \frac{t^2}{2} \|\dot{z}^h(t)\|_U^2 &\leq \int_0^t s \|\dot{z}^h(s)\|_U^2 ds = - \int_0^t s \frac{D}{2} \frac{d}{ds} |z^h(s)|_V^2 ds \\ &= -\frac{D}{2} t |z^h(t)|_V^2 + \frac{D}{2} \int_0^t |z^h(s)|_V^2 ds \leq \frac{1}{4} \|z^h(0)\|_U^2. \quad \square \end{aligned}$$

Lemma 26. Pro každé $D > 0$ a $T > 0$ existuje $C_{D,T} > 0$ nezávislé na diskretizaci tak, že pro každé $t \in [0, T]$, $g \in L^2(0, t; V^*)$ platí

$$\left\| \int_0^t Z_D^h(t-s) g(s) ds \right\|_U \leq C_{D,T} \left(\int_0^t \|g(s)\|_{V^*}^2 ds \right)^{\frac{1}{2}}, \quad (4.34)$$

a pro každé $\varphi \in V^*$

$$\int_0^T \|Z_D^h(s) \varphi\|_U^2 ds \leq C_{D,T} \|\varphi\|_{V^*}^2. \quad (4.35)$$

Důkaz. Nerovnost (4.34) plyne z (4.29), (4.30) dosazením $\varphi = 0$ a $v^h = z^h(t)$

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|z^h(t)\|_U^2 dt \leq -D |z^h(t)|_V^2 + \frac{D}{2} \|z^h t\|_V^2 + \frac{1}{2D} \|g(t)\|_{V^*}^2 \leq \frac{D}{2} \|z^h(t)\|_U^2 + \frac{1}{2D} \|g(t)\|_{V^*}^2.$$

a následnou aplikací Gronwallovy nerovnosti.

K důkazu (4.35) využijeme identifikaci $(L^2(0, T; U))^* = L^2(0, T; U)$. Pro každé $g \in L^2(0, T; U)$ platí

$$\left| \int_0^T (g(s), Z_D^h(T-s) \varphi)_U ds \right| = \left| \int_0^T \langle Z_D^h(T-s) g(s), \varphi \rangle_{V, V^*} ds \right|$$

$$\leq \left\| \int_0^T Z_D^h (T-s) g(s) ds \right\|_V \|\varphi\|_{V^*}.$$

Dosažením $\varphi = 0$, $v^h = \dot{z}^h(t)$ do (4.29), (4.30) dostaneme

$$\frac{D}{2} \frac{d}{dt} \|z^h(t)\|_V^2 dt \leq - \|\dot{z}^h(t)\|_U^2 + \frac{1}{2} \|\dot{z}^h(t)\|_U^2 + \frac{1}{2} \|g(t)\|_U^2 \leq \frac{1}{2} \|g(t)\|_U^2,$$

po integraci a přičtení (4.34)

$$\left\| \int_0^T Z_D^h (T-s) g(s) ds \right\|_V^2 \leq \|z^h(T)\|_V^2 \leq C \int_0^T \|g(s)\|_U^2 ds.$$

Tedy

$$\begin{aligned} \int_0^T \|Z_D^h (s) \varphi\|_U^2 ds &= \int_0^T \|Z_D^h (T-s) \varphi\|_U^2 ds \\ &= \sup_{g \in L^2(0,T;U)} \frac{1}{\|g\|_{L^2(0,T;U)}^2} \left| \int_0^T (g(s), Z_D^h (T-s) \varphi)_U ds \right|^2 \leq C \|\varphi\|_{V^*}^2. \quad \square \end{aligned}$$

4.3.2 Vyjádření chyby

Definice 8. Necht' $\mathbf{u} \in W^{1,2}(0, T; \mathbf{U}, \mathbf{V})$ je přesné řešení (3.27)-(3.30) a

$$\mathbf{u}^h \in C^1([0, T_h]; \mathbf{V}_h)$$

maximální řešení počáteční úlohy (4.3), (4.4) definované na intervalu $[0, T_h)$. Označme pro $i = 1, \dots, L$

$$\begin{aligned} e_i &= u_i^h(t) - u_i(t), & t \in [0, T_h), \\ \psi_i &= \sum_{j,k=1}^L a_{ijk} u_j^h u_k^h + \sum_{j=1}^L b_{ij} u_j^h - \sum_{j,k=1}^L a_{ijk} u_j^h u_k^h - \sum_{j=1}^L b_{ij} u_j^h, & t \in [0, T_h), \\ \rho_i(t) &= R^h u_i(t) - u_i(t), & t \in (0, T_h), \\ \theta_i(t) &= u_i^h(t) - R^h u_i(t), & t \in (0, T_h). \end{aligned} \quad (4.36)$$

Lemma 27. Pro každé $t \in (0, T_h)$, $i = 1, \dots, L$ a $v^h \in V_h$ platí

$$\left(v^h, \dot{\theta}_i \right)_U + D_i [v^h, \theta_i]_V = (v^h, -\dot{\rho}_i + D_i \rho_i + \psi_i)_U. \quad (4.37)$$

Důkaz. Pro $t > 0$ a $i = 1, \dots, L$ je $\dot{u}_i \in V$ podle předpokladu (4.23). Testujeme (3.29) funkcí $v^h \in V_h$, odečteme od (4.3) a využijeme definici (4.14) eliptické projekce R^h

$$\begin{aligned} (v^h, \dot{u}_i^h - \dot{u}_i)_U &= -D_i [v^h, u_i^h - u_i]_V + (v^h, \psi_i)_U \\ &= -D_i [v^h, u_i^h - R^h u_i]_V - D_i [v^h, R^h u_i - u_i]_V + (v^h, \psi_i)_U \\ &= -D_i [v^h, u_i^h - R^h u_i]_V + D_i (v^h, R^h u_i - u_i)_U + (v^h, \psi_i)_U \\ &= -D_i [v^h, \theta_i]_V + (v^h, D_i \rho_i + \psi_i)_U. \end{aligned}$$

Derivováním definice ρ_i a θ_i podle t dostaneme rovnost

$$(v^h, \dot{u}_i^h - \dot{u}_i)_U = (v^h, \dot{\theta}_i + \dot{\rho}_i)_U.$$

Porovnáním vyjde (4.37). □

Lemma 28. *Pro každé $i = 1, \dots, L$ a $t \in (0, T_h)$ platí*

$$\begin{aligned} \theta_i(t) &= Z_i^h(t) e_i(0) - Z_i^h\left(\frac{t}{2}\right) \rho_i\left(\frac{t}{2}\right) - \int_0^{\frac{t}{2}} \dot{Z}_i^h(t-s) \rho_i(s) ds \\ &\quad - \int_{\frac{t}{2}}^t Z_i^h(t-s) \dot{\rho}_i(s) ds + \int_0^t Z_i^h(t-s) [D_i \rho_i(s) + \psi_i(s)] ds \quad (4.38) \end{aligned}$$

kde $Z_i^h = Z_{D_i}^h$.

Důkaz. Necht' $t_0, t \in (0, T_h)$ a $t_0 < \frac{1}{2}t$. Z (4.37) a (4.30) plyne

$$\begin{aligned} \theta_i(t) &= Z_i^h(t-t_0) \theta_i(t_0) + \int_{t_0}^t Z_i^h(t-s) [-\dot{\rho}_i(s) + D_i \rho_i(s) + \psi_i(s)] ds \\ &= Z_i^h(t) \theta_i(t_0) - \int_{t_0}^{t/2} Z_i^h(t-s) \dot{\rho}_i(s) ds \\ &\quad - \int_{t/2}^t Z_i^h(t-s) \dot{\rho}_i(s) ds + \int_{t_0}^t Z_i^h(t-s) [D_i \rho_i(s) + \psi_i(s)] ds. \end{aligned}$$

Integrací per partes¹

¹Vzhledem k ekvivalenci (4.28) a homogenní lineární soustavě obyčejných diferenciálních rovnic s kon-

$$\begin{aligned}
Z_i^h(t-t_0)\theta_i(t_0) - \int_{t_0}^{t/2} Z_i^h(t-s)\dot{\rho}_i(s) ds &= Z_i^h(t-t_0)\theta_i(t_0) \\
&- Z_i^h\left(\frac{t}{2}\right)\rho_i\left(\frac{t}{2}\right) + Z_i^h(t-t_0)\rho_i(t_0) + \int_{t_0}^{t/2} \dot{Z}_i^h(t-s)\rho_i(s) ds \\
&= Z_i^h(t-t_0)e_i(t_0) - Z_i^h\left(\frac{t}{2}\right)\rho_i\left(\frac{t}{2}\right) + \int_{t_0}^{t/2} \dot{Z}_i^h(t-s)\rho_i(s) ds.
\end{aligned}$$

Platí $e_i \in C([0, T_h])$ a

$$\begin{aligned}
\left\| \dot{Z}_i^h(t-s)\rho_i(s) \right\|_U &\leq C(t-s)^{-1} \|\rho_i(s)\|_U \leq Ch(t-s)^{-1}s^{-\frac{1}{2}} =: m(s), \\
\int_0^{t/2} m(s) ds &\leq Ct^{-1} \int_0^{t/2} s^{-\frac{1}{2}} ds < \infty.
\end{aligned}$$

Tedy

$$\begin{aligned}
\lim_{t_0 \rightarrow 0^+} \left[Z_i^h(t-t_0)e_i(t_0) - Z_i^h\left(\frac{t}{2}\right)\rho_i\left(\frac{t}{2}\right) + \int_{t_0}^{t/2} \dot{Z}_i^h(t-s)\rho_i(s) ds \right] \\
= Z_i^h(t)e_i(0) - Z_i^h\left(\frac{t}{2}\right)\rho_i\left(\frac{t}{2}\right) + \int_0^{t/2} \dot{Z}_i^h(t-s)\rho_i(s) ds. \quad \square
\end{aligned}$$

4.3.3 Odhad chyby

Lemma 29. *Nechť platí*

$$\|P^h e_i(0)\|_U = \mathcal{O}(h), \tag{4.39}$$

nebo

$$\|e_i(0)\|_{V^*} = o(h), \quad i = 1, \dots, L. \tag{4.40}$$

stantními koeficienty lze psát

$$Z_i^h(t-s)\dot{\rho}_i(s) = \sum_{\mu, \nu=0}^{M-1} \eta_{i, \mu, \nu}(t-s) \langle \varphi_\nu, \dot{\rho}_i(s) \rangle_{V, V^*} \varphi_\mu = \sum_{\mu, \nu=0}^{M-1} \eta_{i, \mu, \nu}(t-s) \frac{d}{ds} \langle \varphi_\nu, \rho_i(s) \rangle \varphi_\mu$$

kde $\eta_{i, \mu, \nu}$ jsou nekonečně hladké skalární funkce a $\rho_i \in C^1((0, T]; V)$ podle (4.23). Integrujeme součet členů po členu.

Potom

$$\|\theta_i(t)\|_U \leq f_i^h(t) + \left\| \int_0^t Z_i^h(t-s) \psi_i(s) \, ds \right\|_U, \quad t \in (0, T_h), \quad (4.41)$$

kde $f_i^h : (0, T) \rightarrow \mathbb{R}$ je měřitelná funkce proměnné t s vlastnostmi

$$0 \leq f_i^h(t) \leq Cht^{-\frac{1}{2}}, \quad t \in (0, T], \quad (4.42)$$

$$\int_0^T [f_i^h(t)]^2 \, dt = \mathcal{O}(h^2), \quad (4.43)$$

$$\int_0^{2h} [f_i^h(t)]^2 \, dt = o(h^2). \quad (4.44)$$

Důkaz. Definujeme f_i^h podle (4.38)

$$\begin{aligned} f_i^h(t) = & \|Z_i^h(t) e_i(0)\|_U + \|Z_i^h(t/2) \rho_i(t/2)\|_U + \left\| \int_0^{t/2} \dot{Z}_i^h(t-s) \rho_i(s) \, ds \right\|_U \\ & + \left\| \int_{t/2}^t Z_i^h(t-s) \dot{\rho}_i(s) \, ds \right\|_U + D_i \left\| \int_0^t Z_i^h(t-s) \rho_i(s) \, ds \right\|_U \end{aligned}$$

a odhadujeme jednotlivé členy

$$\|Z_i^h(t) e_i(0)\|_U \leq \|P^h e_i(0)\|_U \leq Ch,$$

$$\text{nebo } \|Z_i^h(t) e_i(0)\|_U \leq Ct^{-\frac{1}{2}} \|e_i(0)\|_{V^*} \leq Cht^{-\frac{1}{2}},$$

$$\|Z_i^h(t/2) \rho_i(t/2)\|_U \leq \|\rho_i(t/2)\|_U \leq Ch \|u_i(t/2)\|_V \leq Cht^{-\frac{1}{2}},$$

$$\begin{aligned} \left\| \int_0^{t/2} \dot{Z}_i^h(t-s) \rho_i(s) \, ds \right\|_U & \leq C \int_0^{t/2} (t-s)^{-1} \|\rho_i(s)\|_U \, ds \\ & \leq C \left(\int_0^{t/2} (t-s)^{-2} \, ds \right)^{\frac{1}{2}} \left(\int_0^{t/2} \|\rho_i(s)\|_U^2 \, ds \right)^{\frac{1}{2}} \\ & \leq Cht^{-\frac{1}{2}} \left(\int_0^T \|u_i(s)\|_V^2 \, ds \right)^{\frac{1}{2}} \leq Cht^{-\frac{1}{2}}, \end{aligned}$$

$$\left\| \int_{t/2}^t Z_i^h(t-s) \dot{\rho}_i(s) \, ds \right\|_U \leq \int_{t/2}^t \|\dot{\rho}_i(s)\|_U \, ds \leq Ch \int_{t/2}^t \|\dot{u}_i(s)\|_V \, ds$$

$$\leq Ch \left(\int_{t/2}^t s^{-2} ds \right)^{\frac{1}{2}} \cdot \left(\int_0^{t/2} s^2 \|\dot{u}_i(s)\|_V^2 ds \right)^{\frac{1}{2}} \leq Ch t^{-\frac{1}{2}},$$

$$\left\| \int_0^t Z_i^h(t-s) \rho_i(s) ds \right\|_U \leq C \int_0^t \|\rho_i(s)\|_U ds \leq Ch \int_0^t \|u_i(s)\|_V ds \leq Ch.$$

Dále v případě (4.39) platí

$$\int_0^T \|Z_i^h(t) e_i(0)\|_U^2 dt \leq Ch^2,$$

$$\lim_{h \rightarrow 0} \frac{1}{h^2} \int_0^{2h} \|Z_i^h(t) e_i(0)\|_U^2 dt \leq \lim_{h \rightarrow 0} Ch = 0,$$

v případě (4.40) podle (4.35)

$$\int_0^T \|Z_i^h(t) e_i(0)\|_U^2 dt \leq C \|e_i(0)\|_{V^*}^2 \leq Ch^2,$$

$$\lim_{h \rightarrow 0} \frac{1}{h^2} \int_0^{2h} \|Z_i^h(t) e_i(0)\|_U^2 dt \leq \lim_{h \rightarrow 0^+} \frac{C}{h^2} \|e_i(0)\|_{V^*}^2 = 0.$$

Výpočet L^2 -norem ostatních členů

$$\int_0^T \|Z_i^h(t/2) \rho_i(t/2)\|_U^2 dt \leq Ch^2 \int_0^{T/2} \|u_i(s)\|_U^2 ds \leq Ch^2,$$

$$\int_0^T \left\| \int_0^{t/2} \dot{Z}_i^h(t-s) \rho_i(s) ds \right\|_U^2 dt \leq \int_0^T \frac{t}{2} \left(\int_0^{t/2} \|\dot{Z}_i^h(t-s) \rho_i(s)\|_U^2 ds \right) dt$$

$$= \int_0^{T/2} \left(\int_s^{T-s} \frac{\tau+s}{2} \|\dot{Z}_i^h(\tau) \rho_i(s)\|_U^2 d\tau \right) ds \leq \int_0^{T/2} \left(\int_0^T \tau \|\dot{Z}_i^h(\tau) \rho_i(s)\|_U^2 d\tau \right) ds$$

$$\leq C \int_0^{T/2} \|P^h \rho_i(s)\|_U^2 ds \leq Ch^2 \int_0^T \|u_i(s)\|_V^2 ds \leq Ch^2,$$

$$\begin{aligned}
\int_0^T \left\| \int_{t/2}^t Z_i^h(t-s) \dot{\rho}_i(s) ds \right\|_U^2 dt &\leq \int_0^T \frac{t}{2} \left(\int_{t/2}^t \|\dot{\rho}_i(s)\|_U^2 ds \right) dt \\
&= \int_0^T \left(\int_s^{2s} \frac{t}{2} dt \right) \|\dot{\rho}_i(s)\|_U^2 ds \leq Ch^2 \int_0^T s^2 \|\dot{u}_i(s)\|_V^2 ds \leq Ch^2.
\end{aligned}$$

Integrály

$$\int_0^T \|u_i(s)\|_V^2 ds, \quad \int_0^T s^2 \|\dot{u}_i(s)\|_V^2 ds$$

jsou konečné a nezávisí na h ,

$$\lim_{t \rightarrow 0^+} \int_0^t \|u_i(s)\|_V^2 ds = \lim_{t \rightarrow 0^+} \int_0^t s^2 \|\dot{u}_i(s)\|_V^2 ds = 0$$

stejněměrně vzhledem k h . Platí tedy (4.44). \square

Vlastnost 12 (Interpolační Hölderova nerovnost). *Jestliže*

$$1 \leq p_0 \leq p_1 \leq p_2 \leq \infty, \quad \beta = \frac{\frac{1}{p_0} - \frac{1}{p_1}}{\frac{1}{p_0} - \frac{1}{p_2}}, \quad u \in L^{p_0} \cap L^{p_2}$$

pak

$$\|u\|_{L^{p_1}} \leq \|u\|_{L^{p_0}}^{1-\beta} \|u\|_{L^{p_2}}^\beta. \quad (4.45)$$

Lemma 30. *Pro $0 < t \leq T_h$ platí*

$$\|\psi\|_U \leq C \left(h^{-\frac{3}{2}} \|\theta\|_U^2 + Ch^{\frac{1}{2}} \|\mathbf{u}\|_V^2 + \|\theta\|_U + Ch \|\mathbf{u}\|_V \right), \quad (4.46)$$

$$\|\psi\|_{V^*} \leq C \left(h^{-\frac{1}{2}} \|\theta\|_U^2 + Ch^{\frac{3}{2}} \|\mathbf{u}\|_V^2 + \|\theta\|_U + Ch \|\mathbf{u}\|_V \right). \quad (4.47)$$

Důkaz. Upravíme (4.36)

$$\begin{aligned}
e_j e_k + u_j e_k + u_k e_j &= (u_j^h - u_j) (u_k^h - u_k) + u_j (u_k^h - u_k) + u_k (u_j^h - u_j) \\
&= u_j^h u_k^h - u_j u_k^h - u_k u_j^h + u_j u_k + u_j u_k^h - u_j u_k + u_k u_j^h - u_k u_j = u_j^h u_k^h - u_j u_k,
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\psi_i &= \sum_{j,k=1}^L a_{ijk} e_j e_k + \sum_{j,k=1}^L a_{ijk} u_j e_k + \sum_{j,k=1}^L a_{ijk} u_k e_j + \sum_{j=1}^L b_{ij} e_j \\
&= \sum_{j,k=1}^L a_{ijk} e_j e_k + \sum_{j=1}^L \left(b_{ij} + \sum_{k=1}^L (a_{ijk} + a_{ikj}) u_k \right) e_j.
\end{aligned}$$

Z předpokladu $\mathbf{u} \in \mathbf{L}^\infty$ plyne

$$\begin{aligned} \|\boldsymbol{\psi}\|_{\mathbf{L}_{x^2}^p} &\leq C \left(\sum_{j,k=1}^L \|e_j e_k\|_{L_{x^2}^p} + \sum_{j=1}^L \|e_j\|_{L_{x^2}^p} \right) \\ &\leq C \left(\sum_{j,k=1}^L \left(\|e_j\|_{L_{x^2}^{2p}}^2 + \|e_k\|_{L_{x^2}^{2p}}^2 \right) + \sum_{j=1}^L \|e_j\|_{L_{x^2}^p} \right) \leq C \left(\|\mathbf{e}\|_{L_{x^2}^{2p}}^2 + \|\mathbf{e}\|_{L_{x^2}^p} \right), \quad 1 \leq p < \infty. \end{aligned}$$

Vyjádříme \mathbf{e} pomocí $\boldsymbol{\rho}$, $\boldsymbol{\theta}$, použijeme Hölderovu interpolační nerovnost (4.45), inverzní nerovnost (4.20) a nerovnosti (4.16)

$$\begin{aligned} \|e_i\|_{L_{x^2}^q} &\leq \|\theta_i\|_{L_{x^2}^q} + \|\rho_i\|_{L_{x^2}^q} \leq \\ &\leq \|\theta_i\|_U^{1-\beta} \|\theta_i\|_V^\beta + \|\rho_i\|_U^{1-\beta} \|\rho_i\|_V^\beta \leq Ch^{-\beta} \|\theta_i\|_U + Ch^{1-\beta} \|u_i\|_V, \\ \beta &= \frac{\frac{1}{2} - \frac{1}{q}}{\frac{1}{2} - \frac{1}{6}} = \frac{3}{2} - \frac{3}{q}, \quad 2 \leq q \leq 6. \end{aligned}$$

Pro $q = 2p$, $1 \leq p \leq 3$ tedy platí

$$\|e_i\|_{L_{x^2}^{2p}}^2 \leq C \left(h^{\frac{3}{p}-3} \|\theta_i\|_U^2 + Ch^{\frac{3}{p}-1} \|u_i\|_V^2 \right).$$

Dosažením $p = 2$ resp. $p = 6/5$ a použitím vnoření $V^* \hookrightarrow L_{x^2}^{6/5}$, $V^* \hookrightarrow U$ vyjde (4.46) resp. (4.47). \square

Přistoupíme nyní k vlastnímu odhadu chyby. Teorie obyčejných diferenciálních rovnic zaručuje existenci řešení na nějakém intervalu $[0, T_h)$. Pokud se nám však podaří dokázat odhad

$$\|\mathbf{u}^h(t) - \mathbf{u}(t)\|_U \leq m_h(t), \quad t \in (0, \min(T_h, T_h^*)),$$

kde $m_h : (0, T_h^*] \rightarrow \mathbb{R}$ je spojitá funkce, potom nutně

$$T_h \geq T_h^*, \quad \|\mathbf{u}^h(t) - \mathbf{u}(t)\|_U \leq m_h(t), \quad t \in (0, T_h^*).$$

Takto současně odvodíme odhad chyby a dokážeme existenci řešení.

Lemma 31. *Nechť platí (4.39) nebo (4.40). Potom existuje $h_0 > 0$ tak, že pro $h \leq h_0$ platí $T_h \geq 2h$ a*

$$\int_0^{2h} \|\mathbf{e}(t)\|_U^2 dt \leq Ch^2, \quad (4.48)$$

$$\|\mathbf{e}(t)\|_U \leq Ch t^{-\frac{1}{2}}, \quad 0 < t \leq 2h. \quad (4.49)$$

Důkaz. Použijeme nerovnost Gronwallova typu (A.4) na $(0, \min(2h, T_h))$. Z (4.41) plyne

$$\begin{aligned} \|\boldsymbol{\theta}(t)\|_{\mathcal{U}} &\leq C \sum_{i=1}^L f_i^h(t) + C \int_0^t \|\boldsymbol{\psi}(s)\|_{\mathcal{U}} \, ds \\ &\leq C \underbrace{\sum_{i=1}^L f_i^h(t) + Ch^{\frac{1}{2}} \int_0^t \|\mathbf{u}(s)\|_{\mathcal{V}}^2 \, ds + Ch \int_0^t \|\mathbf{u}(s)\|_{\mathcal{V}} \, ds}_{\phi(t)} \\ &\quad + \int_0^t \underbrace{Ch^{-\frac{3}{2}}}_{\gamma_2(s)} \|\boldsymbol{\theta}(s)\|_{\mathcal{U}}^2 \, ds + \int_0^t \underbrace{C}_{\gamma_1(s)} \|\boldsymbol{\theta}(s)\|_{\mathcal{U}} \, ds. \end{aligned}$$

Funkce $\phi(t)$ zřejmě splňuje (4.42), (4.43), píšeme-li $\min(2h, T_h)$ místo T . Dosadíme do (A.3)

$$\begin{aligned} \Phi(t) &= 2\gamma_2(t)\phi^2(t) + \gamma_1(t)\phi(t) \\ \int_0^{2h} \Phi(t) \, dt &\leq Ch^{-\frac{3}{2}} \int_0^{2h} \phi^2(t) \, dt + Ch^{\frac{1}{2}} \left(\int_0^{2h} \phi^2(t) \, dt \right)^{\frac{1}{2}} = o\left(h^{\frac{1}{2}}\right) \\ \int_0^{2h} \gamma_2(s) \, ds &\leq Ch^{-\frac{1}{2}} = \mathcal{O}\left(h^{-\frac{1}{2}}\right) \\ \int_0^{2h} \gamma_1(s) \, ds &\leq Ch = \mathcal{O}(h), \\ \lim_{h \rightarrow 0} \left(2 \|\Phi\|_{L^1} \|\gamma_2\|_{L^1} e^{\|\gamma_1\|_{L^1}} \right) &= 0. \end{aligned}$$

a existuje $h_0 > 0$ tak, že pro $h < h_0$ je

$$2 \|\Phi\|_{L^1} \|\gamma_2\|_{L^1} e^{\|\gamma_1\|_{L^1}} \leq c < 1.$$

Pro $t \in (0, \min(2h, T_h))$ tedy platí

$$\|\boldsymbol{\theta}(t)\|_{\mathcal{U}} \leq \phi(t) + \frac{\|\Phi\|_{L^1} e^{\|\gamma_1\|_{L^1}}}{1 - 2 \|\Phi\|_{L^1} \|\gamma_2\|_{L^1} e^{\|\gamma_1\|_{L^1}}} \leq \phi(t) + \frac{Ch^{\frac{1}{2}}}{1 - c} \leq \phi(t) + Ch^{\frac{1}{2}}.$$

Proto

$$\int_0^{\min(2h, T_h)} \|\mathbf{e}(t)\|_{\mathcal{U}}^2 \, dt \leq Ch^2, \quad \|\mathbf{e}(t)\|_{\mathcal{U}} \leq Ch t^{-\frac{1}{2}}, \quad t \in (0, \min(2h, T_h)).$$

Z toho ovšem plyne $T_h > 2h$. □

Lemma 32. *Nechť platí (4.39) nebo (4.40). Potom existuje $h_1 > 0$ tak, že pro $h \leq h_1$ platí $T_h \geq T$ a*

$$\int_{2h}^T \|\mathbf{e}(t)\|_{\mathbf{U}}^2 dt \leq Ch^2, \quad (4.50)$$

$$\|\mathbf{e}(t)\|_{\mathbf{U}} \leq Ch t^{-\frac{1}{2}}, \quad 2h \leq t \leq T. \quad (4.51)$$

Důkaz. Aplikujeme (A.4) na interval $(h, \min(T, T_h))$. Do (4.41) dosadíme $t \in (h, T_h)$ a využijeme (4.34) a (4.47),

$$\begin{aligned} \|\theta_i(t)\|_{\mathbf{U}}^2 &\leq [f_i^h(t)]^2 + \left\| \int_0^h Z_i^h(t-s) \psi_i(s) ds \right\|_{\mathbf{U}}^2 + C \int_h^t \|\psi_i(s)\|_{\mathbf{V}^*}^2 ds, \\ \|\boldsymbol{\theta}(t)\|_{\mathbf{U}}^2 &\leq C \underbrace{\sum_{i=1}^L \left[[f_i^h(t)]^2 + \left\| \int_0^h Z_i^h(t-s) \psi_i(s) ds \right\|_{\mathbf{U}}^2 \right]}_{\phi(t)} + \int_h^T [h^4 \|u\|_{\mathbf{V}}^4 + h^2 \|u\|_{\mathbf{V}}^2] ds \\ &\quad + \int_h^t \underbrace{Ch^{-1}}_{\gamma_2(s)} \|\boldsymbol{\theta}(s)\|_{\mathbf{U}}^4 ds + \int_h^t \underbrace{C}_{\gamma_1(s)} \|\boldsymbol{\theta}(s)\|_{\mathbf{U}}^2 ds, \quad t \in (h, T_h). \end{aligned}$$

Z předchozího lemmatu a odhadů (4.46), (4.47) norem ψ pomocí norem θ a ρ plyne

$$\begin{aligned} \|\boldsymbol{\psi}(t)\|_{\mathbf{U}} &\leq Ch^{\frac{1}{2}} t^{-1}, & \|\boldsymbol{\psi}(t)\|_{\mathbf{V}^*} &\leq Ch^{\frac{3}{2}} t^{-1}, \quad t \in (0, 2h), \\ \int_0^h \|\boldsymbol{\psi}(t)\|_{\mathbf{U}} dt &\leq Ch^{\frac{1}{2}}, & \int_0^h \|\boldsymbol{\psi}(t)\|_{\mathbf{V}^*} dt &\leq Ch^{\frac{3}{2}}, \\ \left\| \int_0^h Z_i^h(t-s) \psi_i(s) ds \right\|_{\mathbf{U}} &\leq \int_0^h \|\psi_i(s)\|_{\mathbf{U}} ds \leq Ch^{\frac{1}{2}}, \end{aligned}$$

podle (4.35)

$$\begin{aligned} &\int_h^T \left\| \int_0^h Z_i^h(t-s) \psi_i(s) ds \right\|_{\mathbf{U}}^2 dt \\ &= \int_h^T \left(\int_0^h Z_i^h(t-s_1) \psi_i(s_1) ds_1, \int_0^h Z_i^h(t-s_2) \psi_i(s_2) ds_2 \right)_{\mathbf{U}} d\tau \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \int_0^h \int_0^h \left[\int_h^T (Z_i^h(t-s_1)\psi_i(s_1), Z_i^h(t-s_2)\psi_i(s_2))_U dt \right] ds_1 ds_2 \\
&\leq \int_0^h \int_0^h \prod_{j=1}^2 \left[\int_h^T \|Z_i^h(t-s_j)\psi_i(s_j)\|_U^2 dt \right]^{\frac{1}{2}} ds_1 ds_2 \\
&\leq C \int_0^h \int_0^h \|\psi_i(s_1)\|_{V^*} \|\psi_i(s_2)\|_{V^*} ds_1 ds_2 \leq C \left(\int_0^h \|\psi_i(s)\|_{V^*} ds \right)^2 \leq Ch^3,
\end{aligned}$$

$$\int_h^T \left\| \int_0^h Z_i^h(t-s)\psi_i(s) ds \right\|_U^4 dt \leq Ch \int_h^T \left\| \int_0^h Z_i^h(t-s)\psi_i(s) ds \right\|_U^2 dt \leq Ch^4.$$

Zbylé členy z definice ϕ odhadneme snadno pomocí (4.24), (4.42), (4.43),

$$\int_h^T \phi(s) ds \leq Ch^2, \quad \int_h^T \phi^2(s) ds \leq Ch^3.$$

Dosadíme do (A.3)

$$\begin{aligned}
\Phi(t) &= 2\gamma_2(t)\phi^2(t) + \gamma_1(t)\phi(t), & \int_h^T \gamma_2(s) ds &\leq Ch^{-1} \\
\int_h^T \Phi(t) dt &\leq Ch^2, & \int_h^T \gamma_1(s) ds &\leq C. \\
\lim_{h \rightarrow 0} (2 \|\Phi\|_{L^1} \|\gamma_2\|_{L^1} e^{\|\gamma_1\|_{L^1}}) &= 0.
\end{aligned}$$

Zřejmě existuje $h_1 > 0$ tak, že pro $h \leq h_1$ platí

$$\|\theta(t)\|_{\mathcal{U}}^2 \leq \phi(t) + Ch^2, \quad t \in (h, \min(T_h, T)).$$

Okamžitě dostáváme nerovnost

$$\int_{2h}^T \|\theta(t)\|_{\mathcal{U}}^2 \leq Ch^2.$$

Pro $t \in (2h, T)$ také platí

$$\left\| \int_0^h Z_i^h(t-s)\psi_i(s) ds \right\|_U \leq \int_0^h (t-s)^{-\frac{1}{2}} \|\psi_i(s)\|_{V^*} ds \leq Ch^{-\frac{1}{2}} \int_0^h \|\psi_i(s)\|_{V^*} ds \leq Ch.$$

Tedy

$$\|\boldsymbol{\theta}(t)\|_{\mathcal{U}}^2 \leq Ch^2t^{-1}, \quad t \in (2h, T_h).$$

Uvedené odhady také zaručují existenci diskrétního řešení na celém intervalu $(0, T)$. \square

Poslední věta této kapitoly shrnuje dosažené výsledky o existenci diskrétního řešení a odhad chyby.

Věta 5. *Nechť platí předpoklady (4.22)-(4.25). Nechť je diskrétní počáteční podmínka $\mathbf{u}^{h;0}$ volena tak, že*

$$\|\mathbf{u}^{h;0} - P^h\mathbf{u}^0\|_{\mathcal{U}} = \mathcal{O}(h), \quad (4.52)$$

nebo tak, že

$$\|\mathbf{u}^{h;0} - \mathbf{u}^0\|_{\mathbf{V}^*} = o(h). \quad (4.53)$$

Potom existuje $h_0 > 0$ tak, že při každé volbě diskrétního prostoru V_h splňující $h \leq h_0$ má diskrétní úloha (4.2)-(4.4) právě jedno řešení. Platí

$$\|\mathbf{u}^h - \mathbf{u}\|_{L^2(0,T;\mathcal{U})} \leq Ch, \quad (4.54)$$

$$\|\mathbf{u}^h(t) - \mathbf{u}(t)\|_{\mathcal{U}} \leq Ch t^{-\frac{1}{2}}, \quad 0 < t \leq T. \quad (4.55)$$

Dokázaný odhad chyby řádu $\mathcal{O}(h)$ není optimální. Pro t odražené od nuly lze přesné řešení v prostoru V_h a normě $\|\cdot\|_{\mathcal{U}}$ aproximovat s chybou $\mathcal{O}(h^2)$. Připomeňme, že základem výše provedených důkazů je vlastnost

$$\int_0^T \|\boldsymbol{\rho}(t)\|_{\mathcal{U}}^2 dt \leq Ch^2 \int_0^T \|\mathbf{u}(t)\|_{\mathbf{V}}^2 dt$$

potřebná pro použití nerovnosti Gronwallova typu s kvadratickým členem (A.4)-(A.5). Z (4.17) plyne také

$$\int_0^T \|\boldsymbol{\rho}(t)\|_{\mathcal{U}}^2 dt \leq Ch^4 \int_0^T \|\mathbf{u}(t)\|_{\mathbf{H}_{x^2}^2}^2 dt.$$

Tato nerovnost je ovšem bezcenná, pokud neposílíme předpoklady o přesném řešení. Přijmeme-li pouze (4.22)-(4.25), není konečnost posledního integrálu zaručena.

Poznamenejme ještě, že výše dokázaná věta zaručuje existenci diskrétního řešení pouze pro dostatečně malá h . Při numerických experimentech ovšem nebyly žádné potíže s řešením soustavy obyčejných diferenciálních rovnic (4.6) pozorovány ani na relativně hrubých sítích.

4.3.4 Volba počáteční podmínky

Při semidiskretizaci se obvykle za diskrétní počáteční podmínku bere L^2 -ortogonální projekce skutečné počáteční podmínky, v našem případě

$$u_i^{h;0} = P^h u_i^0, \quad i = 1, \dots, L.$$

Tato volba vyhovuje předpokladům (4.52) věty 5. Při vlastních výpočtech ovšem používáme nespojitě počáteční podmínky tvaru

$$u_i^0(x) = \begin{cases} c_i^0 & x \in [0, r_i^0], \\ 0 & \text{jinak,} \end{cases} \quad (4.56)$$

kde $c_i \geq 0$, $r_i^0 \in (0, R)$. Ortogonální projekce nezáporné funkce u_i^0 již nemusí být nezáporná, v okolí bodu nespojitosti se objevují oscilace. Záporné hodnoty řešení jsou nefyzikální.

Další možností je vzít za diskrétní podmínku lagrangeovskou projekci skutečně počáteční podmínky. Lagrangeovskou projekci jsme definovali pouze pro funkce třídy $H_{x^2}^2$. Funkce (4.56) je ovšem definována v každém bodě, takže můžeme definovat diskrétní počáteční podmínky rovnostmi

$$u_i^{h;0}(x_\mu) = u_i^0(x_\mu), \quad \mu = 0, 1, \dots, M-1, \quad i = 1, \dots, L. \quad (4.57)$$

Oscilace ani záporné hodnoty se neobjevují. Obecně ovšem neplatí rovnost

$$\int_0^R x^2 u_i^{h;0}(x) dx = \int_0^R x^2 u_i^0(x) dx. \quad (4.58)$$

Výraz na pravé straně (4.58) má fyzikální význam celkového množství látky (viz odstavec 2.4.3, str. 19).

Použijeme proto diskrétní počáteční podmínku splňující (4.57), modifikovanou v jednom uzlu tak, aby platila rovnost (4.58) (viz obr. 4.1). Nebudeme se snažit podat obecnou definici třídy nespojitých funkcí, na něž lze tento postup uplatnit. Uvedeme jednoduchý algoritmus výpočtu koeficientů y^0 pro funkci tvaru (4.56).

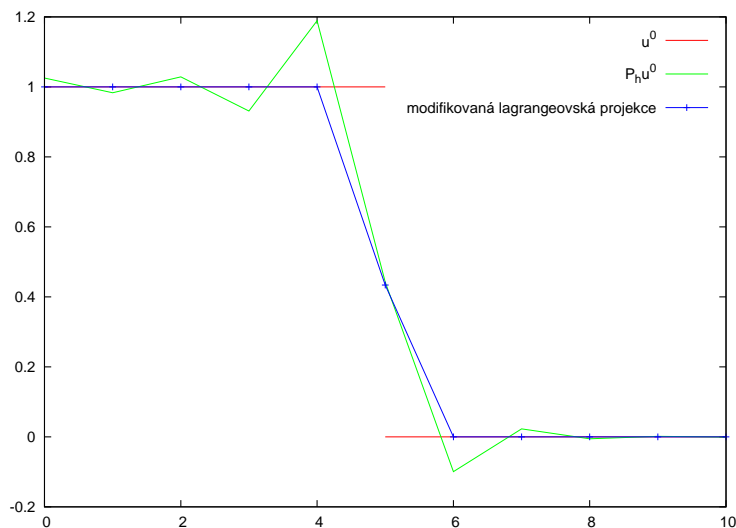
Algoritmus. Nechť jsou dána čísla $c \geq 0$, $r \in (0, R)$ a diskrétní prostor V_h . Spočteme vektor $y \in \mathbb{R}^M$ reprezentující funkci

$$u^{h;0} = \sum_{\mu=0}^{M-1} y_\mu \varphi_\mu. \quad (4.59)$$

algoritmem

- 1 $y = 0$, $\mu = 0$, $J = r^3/3$
- 2 dokud $\mu < M-1$ a $p_\mu < J$,
- 3 $y_\mu = c$
- 4 $J = J - p_\mu$
- 5 $\mu = \mu + 1$
- 6 $y_\mu = cJ/p_\mu$

Obrázek 4.1: Diskretizace nespojité počáteční podmínky.



kde

$$p_\mu = \int_0^R x^2 \varphi_\mu dx, \quad \mu = 0, 1, \dots, M-1.$$

Lemma 33. *Nechť jsou funkce u_i^0 , $i = 1, \dots, L$ tvaru (4.56) a $u_i^{h;0}$ je definována rovnicí (4.59) s koeficienty y_μ spočtenými podle uvedeného algoritmu se vstupními údaji c_i a r_i . Potom*

$$u_i^{h;0} \geq 0, \quad \left\| u_i^{h;0} \right\|_{L^\infty(0,R)} \leq \left\| u_i^0 \right\|_{L^\infty(0,R)}, \quad \int_0^R x^2 (u_i^{h;0} - u_i^0) dx = 0, \quad (4.60)$$

dále

$$\left\| u_i^{h;0} - u_i^0 \right\|_{L^p_{x^2}} \leq Ch^{\frac{1}{p}}, \quad (4.61)$$

$$\left\| u_i^{h;0} - u_i^0 \right\|_{V^*} \leq Ch^{\frac{3}{2}}. \quad (4.62)$$

Důkaz. Platnost (4.60) je zřejmá. K tomu, abychom odvodili (4.61), stačí uvážit, že

$$u_i^{h;0}(x_\nu) = u_i^0(x_\nu)$$

pro všechna $\nu \in \{0, \dots, M-1\} \setminus \{\mu\}$, kde μ je hodnota indexu dosažená v 6. kroku algoritmu. V důsledku toho

$$u_i^{h;0}(x) = u_i^0(x), \quad x \in [0, R] \setminus [x_{\mu-1}, x_{\mu+1}].$$

Tedy

$$\int_0^R x^2 |u_i^{h;0} - u_i^0|^p dx = \int_{x_{\mu-1}}^{x_{\mu+1}} x^2 |u_i^{h;0} - u_i^0|^p dx \leq Ch \left(\|u_i^{h;0}\|_{L^\infty} + \|u_i^0\|_{L^\infty} \right).$$

Zbývá dokázat (4.62). Pro každé $v \in V$ a $\alpha \in \mathbb{R}$ platí

$$\begin{aligned} \int_0^R x^2 v (u_i^{h;0} - u_i^0) dx &= \int_0^R x^2 (v - \alpha) (u_i^{h;0} - u_i^0) dx = \\ &= \int_{x_{\mu-1}}^{x_{\mu+1}} x^2 |v - \alpha| |u_i^{h;0} - u_i^0| dx \leq \left(\int_{x_{\mu-1}}^{x_{\mu+1}} x^2 |v - \alpha|^2 dx \right)^{\frac{1}{2}} \|u_i^{h;0} - u_i^0\|_U. \end{aligned}$$

Zvolíme-li vhodně α a použijeme-li Poincarého nerovnost (4.12), dostaneme

$$\left| (v, u_i^{h;0} - u_i^0)_U \right| \leq Ch \|v\|_V \|u_i^{h;0} - u_i^0\|_U \leq Ch^{\frac{3}{2}} \|v\|_V. \quad \square$$

Vidíme, že chyba aproximace L^p -normách je značně velká. Odhad (4.62) ovšem zaručuje splnění předpokladu (4.53) věty 5.

4.4 Další vlastnosti diskretizace

V této části rozebereme několik dalších vlastností diskretizace, většinou bez přesného zdůvodnění. Domníváme se, že je nutné tyto vlastnosti alespoň stručně zmínit. Některé z nich lze považovat za argumenty proti využití navrhované metody.

Spektrum matic tuhosti a hmoty

V části 4.1 jsme zavedli matici hmoty \mathbf{G}_0 a matici tuhosti \mathbf{G}_1 . Při numerickém řešení soustavy obyčejných diferenciálních rovnic (4.6) je třeba řešit soustavy lineárních rovnic s maticí \mathbf{G}_0 , v případě implicitních metod s maticí blízkou \mathbf{G}_0 . Má tedy význam zabývat se jejím číslem podmíněnosti.

Matice \mathbf{G}_0 je symetrická pozitivně definitní, \mathbf{G}_1 symetrická pozitivně semidefinitní. Za předpokladu rovnoměrné sítě

$$h_\mu = h, \quad \mu = 0, 1, \dots, M-2,$$

lze dokázat

$$Ch^3 \leq \lambda_0(\mathbf{G}_0) < \lambda_1(\mathbf{G}_0) < \dots < \lambda_{M-1}(\mathbf{G}_0) \leq Ch,$$

$$0 = \lambda_0(\mathbf{G}_1) < \lambda_1(\mathbf{G}_1) < \dots < \lambda_{M-1}(\mathbf{G}_1) \leq Ch^{-1},$$

kde $\lambda_\mu(\mathbf{G}_0)$ resp. $\lambda_\mu(\mathbf{G}_1)$, $\mu = 0, \dots, M-1$ jsou vlastní čísla matice \mathbf{G}_0 resp. \mathbf{G}_1 uspořádaná podle velikosti. Spektrální číslo podmíněnosti matice \mathbf{G}_0 je řádově

$$\kappa(\mathbf{G}_0) = \mathcal{O}(h^{-2}).$$

Matice je špatně podmíněná v důsledku použití váhy $x \mapsto x^2$. Připomeňme, že při diskretizaci eliptických úloh metodou konečných prvků v prostorech $H^1(\Omega)$ bez váhy je číslo podmíněnosti matice hmoty řádově $\mathcal{O}(1)$.

Otázka nezápornosti řešení

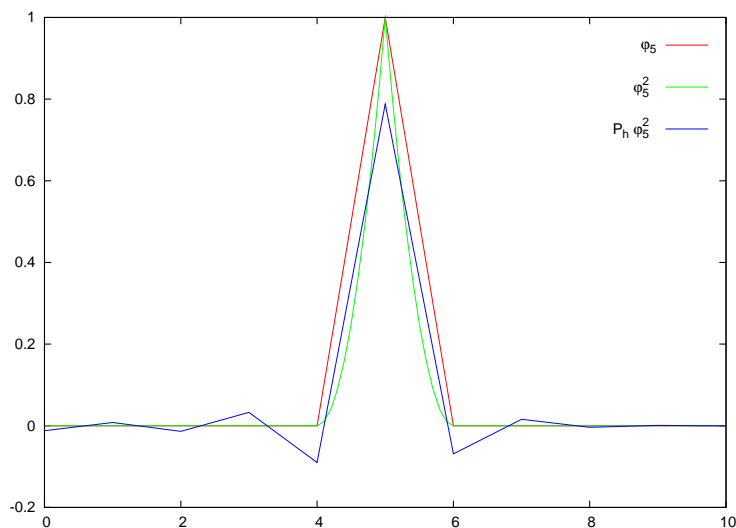
V části 4.3.4 jsme ukázali, jak k nezáporné počáteční podmínce sestavit nezápornou diskrétní aproximaci. Z nezápornosti diskrétní počáteční podmínky ovšem neplyne nezápornost diskrétního řešení. Uvažujme, jaký význam mají v této otázce nelineární reakční členy. Z (4.3) plyne

$$\dot{u}_i^h = D_i P_h \Delta_h u_i^h + \sum_{j,k=1}^L a_{ijk} P_h (u_j^h u_k^h) + \sum_{j=1}^L b_{ij} u_j^h, \quad i = 1, \dots, L, \quad t \in (0, T),$$

kde $\Delta_h : V_h \rightarrow V_h$ je lineární operátor definovaný rovnicí

$$(v^h, -\Delta_h w^h)_U = [v^h, w^h]_V, \quad v^h, w^h \in V_h.$$

Obrázek 4.2: Příklad projekce druhé mocniny bázové funkce.



Diskrétní funkce $P_h(u_j^h u_k^h)$ nemusí být nezáporná ani v případě, kdy jsou u_j^h a u_k^h nezáporné, viz obr. 4.2. Pokud tedy platí² $a_{ijk} > 0$ pro nějakou trojici indexů $j \neq i \neq$

²srov. předpoklady (3.1)-(3.4)

k , můžeme snadno sestrojít nezáporné diskrétní počáteční podmínky tak, aby příslušný kvadratický člen převládl a

$$u_i^h(x_\mu, 0) = 0, \quad \dot{u}_i^h(x_\mu, 0) < 0$$

pro některé $\mu \in \{0, \dots, M-1\}$. Diskrétní řešení potom nabývá i záporných hodnot. Při praktickém výpočtu se však výraznější záporné hodnoty neobjevují.

Volba sítě

Používáme nerovnoměrnou síť. Rozložení uzlů je nastaveno ručně a zkusmo. Nemáme žádný teoreticky podložený postup ale vycházíme zejména ze dvou předpokladů

1. Počáteční podmínky tvaru (4.56) nejsou spojité. V okolí nespojitosti počáteční podmínky volíme menší krok sítě. Zavádíme-li do systému reakcí formální DNA (viz odstavec 2.4.3), chybí v jedné rovnici ze soustavy PDE difuzní člen. Nespojitost počáteční podmínky formální DNA s časem nevymizí, ale v prostoru se neposouvá. Úprava sítě v průběhu výpočtu není potřeba.
2. Vzhledem k očekávanému chování systému (viz odstavec 2.4.2) a výpočtu p_{DSB} (viz odstavec 2.4.3) má přesný výpočet koncentrací radikálů v blízkosti počátku větší význam než přesnost v bodech vzdálenějších. Na druhé straně, umělým ukončením výpočetní oblasti a zavedením okrajové podmínky dochází k nepřesnostem v blízkosti bodu $x = R$. Volíme tedy poměrně velkou výpočetní oblast, s hustou sítí v blízkosti bodu $x = 0$ a velmi hrubou sítí v blízkosti bodu $x = R$.

Platnost inverzního předpokladu (4.10) se při implementaci neověřuje. Lze očekávat, že použití velkých elementů v blízkosti bodu $x = R$ způsobí další zhoršení čísla podmíněnosti matice \mathbf{G}_0 .

Prvky vyššího řádu

Dosud jsme uvažovali diskrétní prostor V_h tvořený po částech lineárními funkcemi. Lze uvažovat též diskretizaci pomocí funkcí po částech polynomiálních stupně p , $p > 2$. Konstrukce bázevých funkcí a výpočet koeficientů $g_{\mu\nu}^0$, $g_{\mu\nu}^1$, $f_{\mu\nu\sigma}$ je problém pouze technický.

Zatím nejsme schopni říci, zda bychom s prvky vyššího řádu dosáhli skutečně větší přesnosti. Dokud nebude vyřešeno odvození optimálního řádu chyby pro lineární prvky, nelze uvažovat o teorii prvků vyššího řádu. Další obtíž je s volbou vhodné nezáporné diskrétní počáteční podmínky. Zůstaneme proto u prvků lineárních.

Kapitola 5

Počítačová realizace

V předchozí kapitole jsme odvodili semidiskrétní úlohu (4.2)-(4.4). Při aplikaci semidiskrétních metod často jako další krok následuje diskretizace vzhledem k času a odvození výpočetního schematu specializovaného pro danou úlohu. My ovšem dále v teorii postupovat nebudeme. Využijeme již hotové softwareové součásti a spolehneme na dostupné knihovny podprogramů pro řešení obyčejných diferenciálních rovnic.

V první části této kapitoly ukážeme, jak připravit semidiskrétní úlohu (4.2)-(4.4) k efektivnímu řešení pomocí podprogramů knihovny ODEPACK. Dále uvedeme příklad aplikace odvozených postupů na konkrétní soustavu chemických reakcí.

5.1 Implementace

Semidiskrétní problém (5) patří do třídy tzv. *stiff* úloh. Explicitní metody řešení obyčejných diferenciálních rovnic typu Runge-Kutta nejsou vhodné. Využijeme implicitní řešič knihovny ODEPACK.

5.1.1 Knihovna ODEPACK

ODEPACK [17] je volně dostupná knihovna podprogramů v jazyce FORTRAN pro řešení počátečních úloh pro soustavy obyčejných diferenciálních rovnic. Jeden z řešičů, podprogram LSODI, umožňuje zadat soustavu obyčejných diferenciálních rovnic v lineárně-implicitním tvaru

$$A(t, y) \frac{dy}{dt} = g(t, y), \quad (5.1)$$

kde matice $A(t, y)$ obecně závisí na čase t i stavové proměnné y . Řešič je založen na implicitní metodě typu BDF (backward differential formula) vhodné pro *stiff* úlohy a využívá Jacobiovu matici pravé strany $\mathcal{D}_y g(t, y)$, pokud je známo její explicitní vyjádření. Mezi další výhody patří úsporné využití paměti při pásové struktuře matic A a $\mathcal{D}_y g(t, y)$.

5.1.2 Soustava obyčejných diferenciálních rovnic

Při práci s obyčejnými diferenciálními rovnicemi je běžné rozlišovat jednotlivé neznámé funkce pouze pomocí jediného indexu. Uspořádáme všechny stupně volnosti $y_{i\nu}$ (viz (4.5), str. 59) do jednoho vektoru

$$\mathbf{Y} = (Y_1, \dots, Y_N)^{\mathbf{T}} = (y_{1,0}, y_{2,0}, \dots, y_{L,0}, y_{1,1}, y_{1,2} \dots y_{L,2}, \dots, y_{L,M-1})^{\mathbf{T}}$$

neboli

$$\begin{aligned} Y_I &= y_{i,\mu} & i &= 1, \dots, L, \\ I = \mathcal{I}(i, \mu) &= i + L\mu, & \mu &= 0, \dots, M-1, \end{aligned} \quad (5.2)$$

$$I = 1, \dots, N = LM.$$

V tomto označení má soustava (4.6) tvar

$$\begin{aligned} \sum_{J=1}^N \mathbb{G}_{IJ} \dot{Y}_J &= \sum_{J,K=1}^N \mathbb{A}_{IJK} Y_J Y_K + \sum_{J=1}^N \mathbb{B}_{IJ} Y_J, & t > 0, \\ Y_I(0) &= Y_I^0, & I &= 1, \dots, N, \end{aligned}$$

kde

$$\begin{aligned} \mathbb{G}_{IJ} &= \delta_{ij} g_{\mu\nu}^0, & I &= \mathcal{I}(i, \mu), & i, j, k &= 1, \dots, L, \\ \mathbb{B}_{IJ} &= -D_i \delta_{ij} g_{\mu\nu}^1 + b_{ij} g_{\mu\nu}^0, & J &= \mathcal{I}(j, \nu), & \mu, \nu, \sigma &= 0, \dots, M-1, \\ \mathbb{A}_{IJK} &= a_{ijk} f_{\mu\nu\sigma}, & K &= \mathcal{I}(k, \sigma), \\ Y_I^0 &= y_{i,\mu}^0. \end{aligned}$$

Připomeňme, že koeficienty $g_{\mu\nu}^0$, $g_{\mu\nu}^1$ a $f_{\mu\nu\sigma}$ závisí na diskretizaci podle vzorců (4.7), a čísla a_{ijk} , b_{ij} , D_i jsou koeficienty původní soustavy parciálních diferenciálních rovnic (3.7).

Soustava je zřejmě typu (5.1). Jacobiho matici pravé strany lze snadno spočítat analyticky

$$\mathbb{J}_{IJ}(\mathbf{Y}) = \mathbb{B}_{IJ} + \sum_{K=1}^N (\mathbb{A}_{IJK} + \mathbb{A}_{IKJ}) Y_K \quad I, J = 1, \dots, N. \quad (5.3)$$

Matice \mathbb{J} , \mathbb{G} , \mathbb{B} i tenzor \mathbb{A} mají pásovou strukturu, která je důsledkem pásovosti koeficientů g^0 , g^1 , f a případně a , b . Platí

$$\beta \leq \omega + L\gamma$$

kde β , ω a γ jsou nejmenší celá nezáporná čísla s vlastnostmi

$$\begin{aligned} |I - J| > \beta &\implies \mathbb{A}_{IJK} = \mathbb{A}_{IKJ} = \mathbb{J}_{IJ} = \mathbb{B}_{IJ} = \mathbb{G}_{IJ} = 0, \\ |i - j| > \omega &\implies a_{ijk} = a_{ikj} = b_{ij} = 0, \\ |\mu - \nu| > \gamma &\implies f_{\mu\nu\sigma} = f_{\mu\sigma\nu} = g_{\mu\nu}^0 = g_{\mu\nu}^1 = 0, \\ I, J, K &= 1, \dots, N, \quad i, j, k = 1, \dots, L, \quad \mu, \nu, \sigma = 0, \dots, M-1. \end{aligned}$$

Zřejmě $\omega \leq L$. Z definice (4.9), str. 60, bázových funkcí diskrétního prostoru V_h plyne $\gamma = 1$, takže

$$\beta \leq 2L.$$

Matice \mathbb{J} a \mathbb{G} jsou tedy $(4L + 1)$ -diagonální, šířka pásu nezávisí na dimenzi diskrétního prostoru V_h .

5.2 Příklady

Jednotky používané při numerických výpočtech jsou vypsány v tabulce 5.1. Stejně jednotky se používají v [1].

Tabulka 5.1: Používané fyzikální jednotky.

veličina	jednotka
délka	nm
čas	ns
látkové množství	N (počet částic ¹)
koncentrace	$N \cdot nm^{-3}$
difuzní součinitel	$nm^2 \cdot ns^{-1}$
rychlostní konstanta reakce prvního řádu	ns^{-1}
rychlostní konstanta reakce druhého řádu	$ns^{-1} \cdot N^{-1} \cdot nm^3$

¹ $N = N_A^{-1} \cdot mol$, $N_A = 6.022 \times 10^{23}$

5.2.1 Radikálové reakce

Použijeme odvozenou metodu na soustavu radikálových reakcí podle článku [7] (str. 4, tabulka I). Látky a reakce jsou vypsány v tabulkách 5.2, 5.3. Voda je ze všech reakcí vynechána. Počáteční podmínky významných radikálů H , OH , e_{aq}^- jsou zvoleny v souladu s [1]. Ostatním látkám přiřadíme pro jednoduchost nulové počáteční podmínky. Pro ilustraci je v tabulce 5.4 vypsána odpovídající soustava parciálních diferenciálních rovnic.

Výpočty byly provedeny pro $R = 1000$, s nerovnoměrnou sítí s $M = 1001$ uzly vytvořenou tak, aby v každém z intervalů $[0, 10]$, $[10, 50]$, $[50, 250]$, $[250, 1000]$ byl přibližně stejný počet uzlů.

Obrázky 5.1, 5.2, ukazují závislost celkového množství (viz (2.14)) nejdůležitějších radikálů na čase. Podle obrázku 5.2 se množství po jisté době ustálí, Radikály se difuzí rozptýlí do většího objemu a koncentrace poklesnou. Soustava reakcí obsahuje pouze jednu reakci prvního řádu. Reakce druhého řádu, jejichž rychlost je dána součinem koncentrací reaktantů, se prakticky zastaví. Pro velká t jsou nelineární reakční členy zanedbatelné, diferenciální rovnice jsou prakticky lineární. Použití implicitní metody řešení soustavy je zde velmi vhodné.

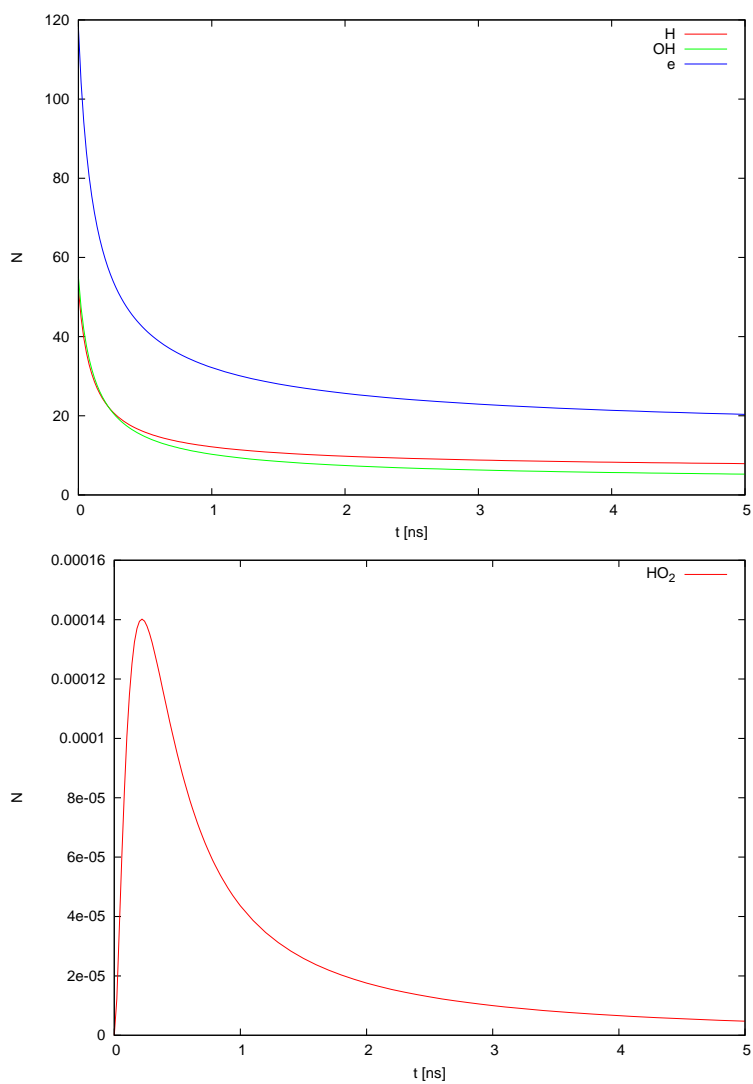
Tabulka 5.2: Počáteční data pro radikálové reakce, parametry počáteční podmínky (4.56).

index	látka	D_i $nm^2 \cdot ns^{-1}$	c_i^0 $N \cdot nm^{-3}$	r_i^0 nm
1	H	7	0.052	6.2
2	HO_2	2.0	0	1000
3	H_2	5.0	0	1000
4	H_2O_2	2.2	0	1000
5	H_3O^+	9	0	1000
6	OH	2.8	0.055	6.2
7	OH^-	5	0	1000
8	O_2	2.1	0	1000
9	O_2^-	2.1	0	1000
10	e	4.5	0.12	6.2

Tabulka 5.3: Radikálové reakce.

č.	reakce	rychlostní konstanta
1	$H + H \rightarrow H_2$	17 $ns^{-1} \cdot N^{-1} \cdot nm^3$
2	$e + H \rightarrow H_2 + OH^-$	42 $ns^{-1} \cdot N^{-1} \cdot nm^3$
3	$e + e \rightarrow H_2 + 2OH^-$	10 $ns^{-1} \cdot N^{-1} \cdot nm^3$
4	$e + OH \rightarrow OH^-$	50 $ns^{-1} \cdot N^{-1} \cdot nm^3$
5	$H + OH \rightarrow$	40 $ns^{-1} \cdot N^{-1} \cdot nm^3$
6	$OH + OH \rightarrow H_2O_2$	7 $ns^{-1} \cdot N^{-1} \cdot nm^3$
7	$H_3O^+ + e \rightarrow H$	38 $ns^{-1} \cdot N^{-1} \cdot nm^3$
8	$H_3O^+ + OH^- \rightarrow$	50 $ns^{-1} \cdot N^{-1} \cdot nm^3$
9	$H + H_2O_2 \rightarrow OH$	0.2 $ns^{-1} \cdot N^{-1} \cdot nm^3$
10	$e + H_2O_2 \rightarrow OH + OH^-$	20 $ns^{-1} \cdot N^{-1} \cdot nm^3$
11	$OH + H_2O_2 \rightarrow HO_2$	0.08 $ns^{-1} \cdot N^{-1} \cdot nm^3$
12	$OH + H_2 \rightarrow H$	0.10 $ns^{-1} \cdot N^{-1} \cdot nm^3$
13	$HO_2 + H \rightarrow H_2O_2$	17 $ns^{-1} \cdot N^{-1} \cdot nm^3$
14	$e + O_2 \rightarrow O_2^-$	32 $ns^{-1} \cdot N^{-1} \cdot nm^3$
15	$HO_2 + OH \rightarrow O_2$	17 $ns^{-1} \cdot N^{-1} \cdot nm^3$
16	$HO_2 + HO_2 \rightarrow H_2O_2 + O_2$	0.003 $ns^{-1} \cdot N^{-1} \cdot nm^3$
17	$H + O_2 \rightarrow HO_2$	17 $ns^{-1} \cdot N^{-1} \cdot nm^3$
18	$O_2^- + H_3O^+ \rightarrow HO_2$	50 $ns^{-1} \cdot N^{-1} \cdot nm^3$
19	$HO_2 \rightarrow H_3O^+ + O_2^-$	10 ns^{-1}

Obrázek 5.1: Vývoj celkového množství významných radikálů.



Tabulka 5.4: Soustava PDE pro reakce z tab. 5.3.

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial [H]}{\partial t} &= D_1 \Delta [H] - 2k_1 [H] [H] - k_{13} [H] [HO_2] - k_9 [H] [H_2O_2] - k_5 [H] [OH] - \\
 &\quad - k_{17} [H] [O_2] - k_2 [H] [e] + k_{12} [H_2] [OH] + k_7 [H_3O^+] [e] \\
 \frac{\partial [HO_2]}{\partial t} &= D_2 \Delta [HO_2] - k_{19} [HO_2] - k_{13} [H] [HO_2] + k_{17} [H] [O_2] - 2k_{16} [HO_2] [HO_2] - \\
 &\quad - k_{15} [HO_2] [OH] + k_{11} [H_2O_2] [OH] + k_{18} [H_3O^+] [O_2^-] \\
 \frac{\partial [H_2]}{\partial t} &= D_3 \Delta [H_2] + k_1 [H] [H] + k_2 [H] [e] - k_{12} [H_2] [OH] + k_3 [e] [e] \\
 \frac{\partial [H_2O_2]}{\partial t} &= D_4 \Delta [H_2O_2] + k_{13} [H] [HO_2] - k_9 [H] [H_2O_2] + k_{16} [HO_2] [HO_2] - k_{11} [H_2O_2] [OH] - \\
 &\quad - k_{10} [H_2O_2] [e] + k_6 [OH] [OH] \\
 \frac{\partial [H_3O^+]}{\partial t} &= D_5 \Delta [H_3O^+] + k_{19} [HO_2] - k_8 [H_3O^+] [OH^-] - k_{18} [H_3O^+] [O_2^-] - k_7 [H_3O^+] [e] \\
 \frac{\partial [OH]}{\partial t} &= D_6 \Delta [OH] + k_9 [H] [H_2O_2] - k_5 [H] [OH] - k_{15} [HO_2] [OH] - k_{12} [H_2] [OH] - \\
 &\quad - k_{11} [H_2O_2] [OH] + k_{10} [H_2O_2] [e] - 2k_6 [OH] [OH] - k_4 [OH] [e] \\
 \frac{\partial [OH^-]}{\partial t} &= D_7 \Delta [OH^-] + k_2 [H] [e] + k_{10} [H_2O_2] [e] - k_8 [H_3O^+] [OH^-] + k_4 [OH] [e] + \\
 &\quad + 2k_3 [e] [e] \\
 \frac{\partial [O_2]}{\partial t} &= D_8 \Delta [O_2] - k_{17} [H] [O_2] + k_{16} [HO_2] [HO_2] + k_{15} [HO_2] [OH] - k_{14} [O_2] [e] \\
 \frac{\partial [O_2^-]}{\partial t} &= D_9 \Delta [O_2^-] + k_{19} [HO_2] - k_{18} [H_3O^+] [O_2^-] + k_{14} [O_2] [e] \\
 \frac{\partial [e]}{\partial t} &= D_{10} \Delta [e] - k_2 [H] [e] - k_{10} [H_2O_2] [e] - k_7 [H_3O^+] [e] - k_4 [OH] [e] - \\
 &\quad - k_{14} [O_2] [e] - 2k_3 [e] [e]
 \end{aligned}$$

5.2.2 Závislost na koncentraci kyslíku

Systém reakcí z tabulky 5.3 doplníme zavedením formální DNA podle odstavce 2.4.3 (tabulka 5.6, rychlostní konstanty poskytnuty Ing. Barillou). V tabulce 5.5 jsou počáteční data, koncentrace kyslíku O_2 je nulová.

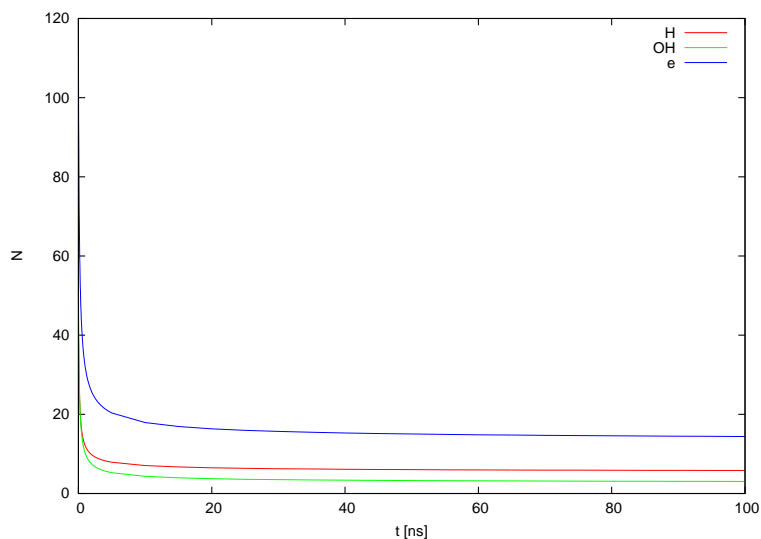
Soustavu můžeme vyřešit numericky na dostatečně dlouhém časovém intervalu $(0, T)$ a položit

$$\begin{aligned}
 p_{SSB} &= N_1(0) - N_1(T), & N_1(t) &= 4\pi \int_0^R x^2 u_1(x, t) dx, \\
 p_{DSB} &= p_{SSB}^2.
 \end{aligned}$$

Počáteční podmínka pro formální DNA stanovíme zkusmo, abychom při nulové koncentraci kyslíku získali hodnotu p_{DSB} v souladu s [1].

Provedeme-li výpočet pro různé počáteční hodnoty koncentrace kyslíku, zjistíme závislost počtu dvojných zlomů na koncentraci kyslíku. Graf této závislosti je na obr. 5.3. Koncentrace kyslíku rozpuštěného ve vodě za normálních podmínek je přibližně $2.7 \cdot 10^{-4}$ mol/l.

Obrázek 5.2: Vývoj celkového množství významných radikálů na delším časovém intervalu.



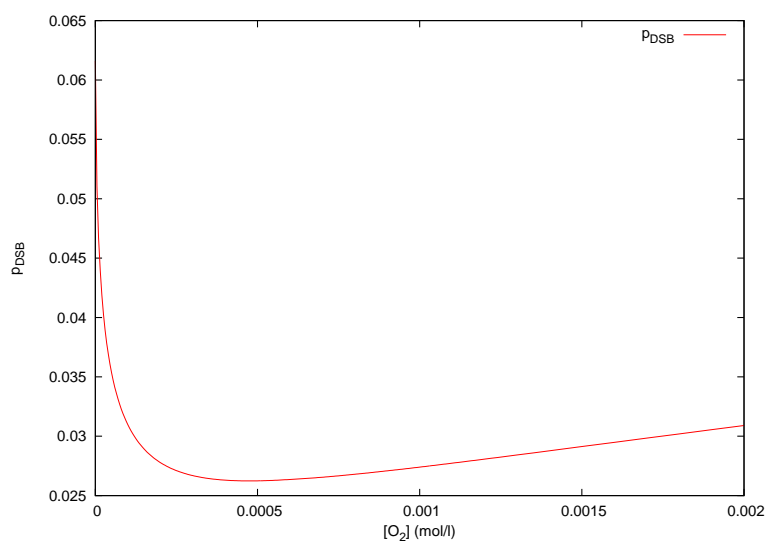
Tabulka 5.5: Počáteční data pro výpočet p_{DSB} .

index	látka	D_i $nm^2 \cdot ns^{-1}$	c_i^0 $N \cdot nm^{-3}$	r_i^0 nm
1	<i>DNA</i>	0	7.5×10^{-6}	100
2	<i>H</i>	7	0.052	6.2
3	<i>HO₂</i>	2.0	0	10000
4	<i>H₂</i>	5.0	0	10000
5	<i>H₂O₂</i>	2.2	0	10000
6	<i>H₃O⁺</i>	9	6×10^{-8}	10000
7	<i>OH</i>	2.8	0.055	6.2
8	<i>OH⁻</i>	5	6×10^{-8}	10000
9	<i>O₂</i>	2.1	0.0	10000
10	<i>O₂⁻</i>	2.1	0	10000
11	<i>e</i>	4.5	0.12	6.2

Tabulka 5.6: Reakce formální DNA.

č.	reakce	rychlostní konstanta
20	$DNA + H \rightarrow$	0.193536 $ns^{-1} \cdot N^{-1} \cdot nm^3$
21	$DNA + OH \rightarrow$	3.87072 $ns^{-1} \cdot N^{-1} \cdot nm^3$
22	$DNA + e \rightarrow$	1.145152 $ns^{-1} \cdot N^{-1} \cdot nm^3$
23	$DNA + HO_2 \rightarrow$	0.96768 $ns^{-1} \cdot N^{-1} \cdot nm^3$

Obrázek 5.3: Závislost pravděpodobnosti vzniku dvojných zlomů na koncentraci kyslíku.



Je známo (viz [1]), že kyslík ovlivňuje poškození DNA γ -zářením dvojným způsobem. Při malých koncentracích má radioprotektivní účinky, při větších koncentracích naopak vznik poškození DNA podporuje. Podle obr. 5.3 model toto chování, alespoň kvalitativně, zachycuje.

5.3 Zhodnocení modelu

Numerické experimenty ukazují, že model i numerická metoda jsou vhodné pro simulaci radikálových reakcí. Slabinou modelu je začlenění poškození DNA. V případě prvního modelu (2.13) využívajícího pojmu formální DNA, se výsledky výpočtů alespoň kvalitativně shodují s fyzikální skutečností. Numerická metoda, jejíž vlastnosti byly studovány v kapitole 4 pouze pro případ kladných difuzních koeficientů, dává dobré výsledky i pro formální DNA s nulovým difuzním koeficientem.

Model však není schopen poskytnout spolehlivé číselné hodnoty. Vyžaduje také zkusmo nastavit počáteční podmínku formální DNA, což důvěryhodnost modelu jistě nezvyšuje. Výsledky jsou poměrně citlivé na změny parametrů výpočetní oblasti R a T . Jak již bylo uvedeno v části 5.2.1, soustava parciálních diferenciálních rovnic popisující radikálové reakce pro velká t degeneruje. Pro velká t jsou prakticky nulové všechny reakční členy kromě těch, které mají původ v reakcích radikálů s formální DNA. Je možné, že formální DNA ovlivňuje soustavu radikálových reakcí více, než je fyzikálně přípustné. Volba délky časového intervalu zde hraje velkou roli.

Horší je situace v případě druhého modelu (2.14)-(2.17), využívajícího integrální průměr přes různé časy setkání clusteru radikálů s DNA. V tomto případě nejsme dosud schopni získat rozumné výsledky. Je nutné vhodně nastavit parametry α_i v (2.16). Při chybné volbě vyjde $t_m = +\infty$ ve výrazu (2.15) a výpočet není možné provést. Není jasné, zda je integrál (2.16) s mezí $t_m = +\infty$ konečný. Volba parametrů je zde obtížnější než v případě modelu s formální DNA.

Kapitola 6

Závěr

V předchozích kapitolách byl popsán matematický model chemické fáze radiobiologického procesu. Základem modelu je soustava semilineárních evolučních parciálních diferenciálních rovnic (3.7) pro koncentrace radikálů a dalších chemických látek, vystupujících v reakcích ovlivňujících poškození DNA. Byly odvozeny některé teoretické výsledky týkající se této soustavy a numerická metoda pro řešení příslušné počáteční úlohy. V rámci diplomové práce byl model také realizován na počítači a získány numerické výsledky, které jsou kvalitativně srovnatelné s fyzikální skutečností. Věříme, že model je použitelný nejen pro studium vlivu koncentrace kyslíku na poškození DNA, ale i pro zkoumání vývoje radikálového clusteru za přítomnosti jiných radioprotektivních nebo radiosenzitivních látek.

Na tomto místě je vhodné upozornit na otázky související s modelem, které v diplomové práci nebyly vyřešeny. Především je zde problém počátečních a okrajových podmínek pro soustavu parciálních diferenciálních rovnic (3.7). Dostatečně detailní experimentální údaje pro volbu průběhu počáteční podmínky nejsou k dispozici. Cílem každého dalšího modelu vycházejícího z rovnic (3.7) by proto mělo být dosažení co nejvyšší obecnosti počátečních podmínek. Měla by být ověřena vhodnost volby Neumannových okrajových podmínek. Pokud to bude možné, měly by být navrženy lepší okrajové podmínky, které by umožnily simulovat rozplynutí clusteru difuzí, aniž by bylo nutné volit velkou výpočetní oblast.

Další zlepšení jsou potřeba pro modelování interakce radikálů s DNA. Z fyzikálního hlediska jsou modely popsané v této práci příliš zjednodušující.

Význam důkazu existence přesného řešení úlohy (3.27)-(3.30) Galerkinovou metodou je diskutabilní. Pokud by bylo možné odvodit apriorní odhad norem galerkinovských aproximací i v obecném případě (tj. pouze za předpokladů (3.1)-(3.4)), značně by se zjednodušila také teorie numerické metody. Galerkinovské aproximace obecně mohou nabývat záporných hodnot, a nejsou tedy fyzikální. Důkazové techniky používající prostory spojitých funkcí (viz [19]) mohou být úspěšnější, nelze z nich však vycházet při návrhu numerické metody.

Co se týče numerického řešení, lze pokračovat ke konečným prvkům vyššího řádu. Alternativně lze uvažovat o technice tzv. mass lumping (srov. [25]), která by mohla zajistit nezápornost diskrétního řešení. Numerické metody pro řešení rovnic (3.7) ve třech dimenzích patrně nejsou potřeba. Metody pro válcově symetrická řešení by mohly najít aplikace při simulaci účinků jiných typů ionizujícího záření (protony, lehké ionty).

Dodatek A

Nerovnost Gronwallova typu

V literatuře lze nalézt různá zobecnění Gronwallovy nerovnosti, obvykle ve tvaru implikace

$$\left(\xi \in C([a, b]), \quad 0 \leq \xi(t) \leq \phi(t) + \int_a^t K(\xi; s) ds, \quad t \in [a, b] \right) \\ \implies \left(\xi(t) \leq \psi(t), \quad t \in [a, b] \right),$$

s různými funkcemi ϕ , ψ a různou závislostí na neznámé funkci $K(\xi, \cdot)$. Např. v [18] je uvedena nerovnost obsahující na pravé straně obecně p -tou mocninu neznámé funkce ξ a s $\phi(t) = \text{konst.}$, v [6] se připouští lineární závislost $K(\xi, \cdot)$ a singulární $\phi(t) = At^{-\alpha}$, $0 < \alpha < 1$, apod.

Cílem této kapitoly je dokázat nerovnost Gronwallova typu, použitelnou při odhadu chyby diskrétního řešení. Uvažujme tedy první i druhou mocninou neznámé funkce na pravé straně a dostatečně obecnou funkci ϕ . Nejprve provedeme důkaz pro jednodušší případ $\phi = \text{konst.}$

Lemma 34. *Nechť $\phi \in \mathbb{R}$, $\phi \geq 0$ a $\xi \in C([a, b])$, $\gamma_1, \gamma_2 \in L^1(a, b)$ jsou nezáporné funkce splňující nerovnosti*

$$\phi \|\gamma_2\|_{L^1} e^{\|\gamma_1\|_{L^1}} < 1, \\ \xi(t) \leq \phi + \int_a^t \gamma_2(s) \xi^2(s) ds + \int_a^t \gamma_1(s) \xi(s) ds, \quad t \in (a, b). \quad (\text{A.1})$$

Potom

$$\xi(t) \leq \frac{\phi e^{\|\gamma_1\|_{L^1}}}{1 - \phi \|\gamma_2\|_{L^1} e^{\|\gamma_1\|_{L^1}}}, \quad t \in [a, b]. \quad (\text{A.2})$$

Důkaz. Vyšetříme pouze případ $\phi > 0$. Tvrzení pro $\phi = 0$ dostaneme limitním přechodem.

Kladná absolutně spojitá funkce

$$\eta(t) = \phi + \int_a^t \gamma_2(s)\xi^2(s) ds + \int_a^t \gamma_1(s)\xi(s) ds$$

splňuje nerovnost

$$\dot{\eta}(t) = \gamma_2(t)\xi^2(t) + \gamma_1(t)\xi(t) \leq \gamma_2(t)\eta^2(t) + \gamma_1(t)\eta(t).$$

Odstraníme lineární člen substitucí

$$\zeta(t) = e^{-\int_a^t \gamma_1(s) ds} \eta(t), \quad \dot{\zeta}(t) \leq \gamma_2(t) e^{\int_a^t \gamma_1(s) ds} \zeta^2(t) \leq \gamma_2(t) e^{\|\gamma_1\|_{L^1}} \zeta^2(t)$$

a integrujeme

$$\begin{aligned} \frac{\dot{\zeta}(t)}{\zeta^2(t)} &\leq \gamma_2(t) e^{\|\gamma_1\|_{L^1}}, \\ \frac{1}{\zeta(a)} - \frac{1}{\zeta(t)} &\leq \|\gamma_2\|_{L^1} e^{\|\gamma_1\|_{L^1}}, \\ \zeta(t) &\leq \frac{\zeta(a)}{1 - \zeta(a) \|\gamma_2\|_{L^1} e^{\|\gamma_1\|_{L^1}}} \leq \frac{\phi}{1 - \phi \|\gamma_2\|_{L^1} e^{\|\gamma_1\|_{L^1}}}, \\ \eta(t) &\leq \frac{\phi e^{\|\gamma_1\|_{L^1}}}{1 - \phi \|\gamma_2\|_{L^1} e^{\|\gamma_1\|_{L^1}}}. \quad \square \end{aligned}$$

Lemma 35. *Nechť $\xi \in C([a, b])$ je nezáporná, $\gamma_1, \gamma_2 \in L^1(a, b)$ jsou nezáporné, a ϕ je nezáporná měřitelná funkce. Nechť*

$$\Phi(t) = 2\gamma_2(t)\phi^2(t) + \gamma_1(t)\phi(t), \quad t \in (a, b). \quad (\text{A.3})$$

Nechť $\Phi \in L^1(a, b)$ a platí

$$\begin{aligned} 2\|\Phi\|_{L^1} \|\gamma_2\|_{L^1} e^{\|\gamma_1\|_{L^1}} &< 1, \\ \xi(t) &\leq \phi(t) + \int_a^t \gamma_2(s)\xi^2(s) ds + \int_a^t \gamma_1(s)\xi(s) ds, \quad t \in (a, b). \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

Potom

$$\xi(t) \leq \phi(t) + \frac{\|\Phi\|_{L^1} e^{\|\gamma_1\|_{L^1}}}{1 - 2\|\Phi\|_{L^1} \|\gamma_2\|_{L^1} e^{\|\gamma_1\|_{L^1}}}, \quad t \in (a, b). \quad (\text{A.5})$$

Důkaz. Funkce

$$\eta(t) = \int_a^t \gamma_2(s)\xi^2(s) ds + \int_a^t \gamma_1(s)\xi(s) ds$$

je spojitá a nezáporná, platí

$$\xi(t) \leq \phi(t) + \eta(t).$$

Obě strany poslední nerovnosti jsou nezáporné, lze umocnit

$$\begin{aligned} \xi^2(t) &\leq (\phi(t) + \eta(t))^2 \leq 2\phi^2(t) + 2\xi^2(t), \\ \eta(t) &\leq \int_a^t \gamma_2(s) (\eta(s) + \phi(s))^2 ds + \int_a^t \gamma_1(s) (\eta(s) + \phi(s)) ds \\ &\leq \int_a^t \Phi(s) ds + \int_a^t 2\gamma_2(s)\eta^2(s) ds + \int_a^t \gamma_1(s)\eta(s) ds. \end{aligned}$$

Podle předchozího lemmatu tedy

$$\begin{aligned} \eta(t) &\leq \frac{\|\Phi\|_{L^1} e^{\|\gamma_1\|_{L^1}}}{1 - \|\Phi\|_{L^1} \|2\gamma_2\|_{L^1} e^{\|\gamma_1\|_{L^1}}}, \\ \xi(t) &\leq \phi(t) + \frac{\|\Phi\|_{L^1} e^{\|\gamma_1\|_{L^1}}}{1 - 2\|\Phi\|_{L^1} \|\gamma_2\|_{L^1} e^{\|\gamma_1\|_{L^1}}}. \end{aligned}$$

□

Seznam tabulek

5.1	Používané fyzikální jednotky.	88
5.2	Počáteční data pro radikálové reakce.	89
5.3	Radikálové reakce.	89
5.4	Soustava PDE pro reakce z tab. 5.3.	91
5.5	Počáteční data pro výpočet p_{DSB}	92
5.6	Reakce formální DNA.	93

Seznam obrázků

4.1	Diskretizace nespojité počáteční podmínky.	82
4.2	Příklad projekce druhé mocniny bázové funkce.	84
5.1	Vývoj celkového množství významných radikálů.	90
5.2	Vývoj celkového množství významných radikálů na delším časovém intervalu.	92
5.3	Závislost pravděpodobnosti vzniku dvojných zlomů na koncentraci kyslíku.	93

Literatura

- [1] Barilla J., Lokajčec M. (2000): The Role of Oxygen in DNA Damage by Ionizing Particles.
J. theor. Biol. **207**, 405-411
- [2] Barilla J. (1994): Mechanismus radiobiologického účinku v biologicky důležitých objektech.
Kandidátská disertační práce, Fyzikální ústav AVČR, Praha.
- [3] Bednář J. (1990): Theoretical Foundations of Radiation Chemistry.
Academia, Praha.
- [4] Běgusová M., Sy D., Charlier M., Spothem-Maurizot M. (2000): Radiolysis of nucleosome core DNA: a modelling approach.
Int. J. Radiat. Biol. **76**, 1063-1073.
- [5] Blok J., Loman H. (1973): The effects of γ -radiation in DNA.
Current Topics in Radiation Research Quarterly **9**, 165-245.
- [6] Cazenave T., Haraux A. (1998): An Introduction to Semilinear Evolution Equations.
Oxford University Press, Oxford.
- [7] Chatterjee A., Magee J.L., Dey S. K. (1983): The Role of Homogenous Reactions in the Radiolysis of Water.
Rad. Res. **96**, 1-19.
- [8] Gajewski, H., Gröger, K., Zacharias, K. (1974): Nichtlineare Operatorgleichung und Operator-differentialgleichungen.
Akademie-Verlag, Berlin.
- [9] Kofroň, J. (2004): Obyčejné diferenciální rovnice v reálném oboru.
Skripta MFF UK, Karolinum, Praha.
- [10] Kufner, A. (1980): Weighted Sobolev Spaces.
BSB B.G.Teubner Verlagsgesellschaft, Leipzig.

- [11] Larsson, S., Thomée, V. (2003): Partial Differential Equations with Numerical Methods. Springer-Verlag, Berlin.
- [12] Lokajíček M. a kol. (2002): Onkologické centrum s hadronovou radioterapií. *Studijní zpráva FzÚ AV ČR*, <http://www.particle.cz/medicine/studie.pdf>
- [13] Michael B. D., Prise K.M. (1996): A multiple-radical model for radiation action on DNA and the dependence of OER on LET. *Int. J. Radiat. Biol.* **69**, 351-358.
- [14] Navrátil O. a kol. (1985): Jaderná chemie. Academia, Praha.
- [15] Nečas, J. (1967): Les méthodes directes en théorie des équations elliptiques. Academia, Praha.
- [16] Nikjoo H., O'Neill P., Goodhead D.T., Terissol M. (1997): Computational modelling of low-energy electron-induced DNA damage by early physical and chemical events. *Int. J. Radiat. Biol.* **71**, 467-483.
- [17] ODEPACK, A Systematized Collection of ODE Solvers. <http://www.llnl.gov/CASC/odepack/>, <http://www.netlib.org/odepack/>.
- [18] Oguntuase, J.A. (2001): On an inequality of Gronwall. *Journal of Inequalities in Pure and Applied Mathematics* **2(1)**, Art. 9.
- [19] Pao C. V. (1992): Nonlinear parabolic and elliptic equations. Plenum Press, New York.
- [20] Payne, L.E., Weinberger, H.F. (1960): An optimal Poincaré Inequality for Convex Domains. *Archive for Rational Mechanics and Analysis* **5**, 286-292.
- [21] Prise K. M. a kol. (1998): A review of dsb induction data for varying quality radiations. *Int. J. Radiat. Biol.* **74**, 173-184.
- [22] Rokyta (2004): Klasická a moderní teorie parciálních diferenciálních rovnic. *Připravovaná skripta*, <http://www.karlin.mff.cuni.cz/~rokyta/vyuka/skripta-pdr>
- [23] Rothe, F. (1984): Global Solutions of Reaction-Diffusion systems. Springer-Verlag, Berlin.
- [24] Schwarz H. A. (1969): Applications of the Spur Diffusion Model to the Radiation Chemistry of Aqueous Solutions. *Journal of Physical Chemistry* **73**, 1928-1937.

- [25] Thomée V. (1984): Galerkin Finite Element Methods for Parabolic Problems. Springer-Verlag, Berlin.
- [26] Vacík, J. (1986): Obecná chemie. SPN, Praha.
- [27] Virius M. (1998): Aplikace matematické statistiky - metoda Monte Carlo. ČVUT, Praha.
- [28] Zeidler, E. (1990): Nonlinear Functional Analysis and its Applications (II/A: Linear Monotone Operators). Springer-Verlag, Berlin.