

Autoreferat - habilitacja

1. **Imię i nazwisko:** Lucjan Sapa

2. **Posiadane dyplomy i stopnie naukowe:**

- (a) doktor nauk matematycznych w zakresie matematyki, Uniwersytet Jagielloński w Krakowie, Wydział Matematyki i Fizyki;

rozprawa: *Metoda różnicowa dla układu paraboliczno-eliptycznego*

promotor: prof. dr hab. Marian Malec

recenzenci: prof. dr hab. Tadeusz Dłotko

prof. dr hab. Zdzisław Kamont

prof. dr hab. Stanisław Sędziwy

- (b) magister matematyki, Uniwersytet Jagielloński w Krakowie, Wydział Matematyki i Fizyki;

praca: *Metoda Newtona rozwiązywania równań*

promotor: prof. dr hab. Bolesław Szafirski

- (c) magister informatyki, Uniwersytet Jagielloński w Krakowie, Wydział Matematyki i Fizyki;

praca: *Metoda różnic skończonych dla układu paraboliczno-eliptycznego*

promotor: prof. dr hab. Marian Malec

3. **Zatrudnienie w jednostkach naukowych:**

- (a) asystent na Wydziale Matematyki Stosowanej Akademii Górniczo-Hutniczej w Krakowie;
- (b) wykładowca na Wydziale Matematyki Stosowanej Akademii Górniczo-Hutniczej w Krakowie;
- (c) starszy wykładowca na Wydziale Matematyki Stosowanej Akademii Górniczo-Hutniczej w Krakowie;
- (d) adiunkt na Wydziale Matematyki Stosowanej Akademii Górniczo-Hutniczej w Krakowie.

4. **Osiągnięcia naukowe, o których mowa w art. 219 ust. 1 pkt. 2 ustawy z dnia 20 lipca 2018 r. Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce (Dz. U. z 2020 r. poz. 85 z późn. zm.):**

- (a) cykl publikacji pod tytułem: **Metody analityczne i numeryczne dla równań i układów równań różniczkowych cząstkowych w modelach dyfuzji oraz transportu;**

- (b) publikacje wchodzące w skład cyklu:

[A1] L. Sapa, *A finite difference method for quasi-linear and nonlinear differential functional parabolic equations with Dirichlet's condition*, Annales Polonici Mathematici 93 (2008), 113–133.

[A2] L. Sapa, *Existence, uniqueness and estimates of classical solutions to some evolutionary system*, Opuscula Mathematica 35 (2015), 935–956.

[A3] | L. Sapa, *Global existence and uniqueness of a classical solution to some differential evolutionary system*, Rocky Mountain Journal of Mathematics 47 (2017), 2351–2380.

[A4] | R. Filipek, P. Kalita, L. Sapa, K. Szyszkiewicz, *On local weak solutions to Nernst–Planck–Poisson system*, Applicable Analysis 96 (2017), 2316–2332.

Załączam oświadczenia współautorów.

[A5] | L. Sapa, *Difference methods for parabolic equations with Robin condition*, Applied Mathematics and Computation 321 (2018), 794–811.

[A6] | L. Sapa, B. Bożek, M. Danielewski, *Existence, uniqueness and properties of global weak solutions to interdiffusion with Vegard rule*, Topological Methods in Nonlinear Analysis 52 (2018), 423–448.

Załączam oświadczenia współautorów.

[A7] | B. Bożek, L. Sapa, M. Danielewski, *Difference methods to one and multidimensional interdiffusion models with Vegard rule*, Mathematical Modelling and Analysis 24 (2019), 276–296.

Załączam oświadczenia współautorów.

[A8] | L. Sapa, B. Bożek, K. Tkacz-Śmiech, M. Zajusz, M. Danielewski, *Interdiffusion in many dimensions: mathematical models, numerical simulations and experiment*, Mathematics and Mechanics of Solids 25 (2020), 2178–2198.

Załączam oświadczenia współautorów.

[A9] | L. Sapa, *Parabolic-elliptic system modeling biological ion channels*, Journal of Differential Equations 291 (2021), 1–26, doi.org/10.1016/j.jde.2021.04.030.

Artykuły [A3] - [A9] są opublikowane w czasopismach będących w bazie Journal Citation Reports (JCR). Czasopismo, w którym opublikowany jest artykuł [A1] jest w tej bazie od 2009 roku (w roku publikacji było na Liście filadelfijskiej), zaś czasopismo, w którym opublikowany jest artykuł [A2] jest na Liście filadelfijskiej od 2019 roku i nie ma go jeszcze w bazie JCR. Suma punktów według punktacji MNiSzW za artykuły wchodzące w skład osiągnięcia wynosi 391 (obliczenia zgodnie z rokiem publikacji). Według bazy JCR ich sumaryczny impact factor wynosi 10.411 (obliczenia zgodnie z rokiem publikacji). Łączna liczba cytowań tych artykułów według bazy Web of Science to 29 (w tym bez autocytowań 15). Średnia objętość każdej z dziewięciu prac to około 22.5 stron. Autorem pięciu artykułów jestem tylko ja.

- (c) omówienie celu naukowego i wyników cyklu [A1] - [A9] oraz pozostałych prac naukowo-badawczych:

1 Wprowadzenie

1.1 Zjawisko dyfuzji

Dyfuzja to jedno z najczęściej występujących zjawisk fizycznych w naturze. Nazwa pochodzi od łacińskiego słowa „diffusio” czyli rozprzestrzenianie. Jest to proces samorzutnego rozprzestrzeniania i przenikania się cząsteczek lub energii w każdym ośrodku (np. w gazie, cieczy, ciele stałym, itd.), będący konsekwencją chaotycznych zderzeń cząsteczek dyfundującej substancji między sobą lub z cząsteczkami otaczającego ją ośrodka. W przeciwieństwie do mieszania nie wymaga dostarczenia dodatkowej energii z zewnątrz układu. Rozpatruje się dwa podstawowe rodzaje dyfuzji:

- dyfuzja śledzona - proces mikroskopowy polegający na chaotycznym ruchu pojedynczej cząsteczki, np. ruchy Browna,
- dyfuzja chemiczna - proces makroskopowy obejmujący makroskopowe ilości materii (lub energii), zwykle opisywany równaniem ciągłości nazywanym też równaniem dyfuzji i prowadzący do wyrównywania stężenia (lub temperatury) każdej z dyfundujących substancji w całym układzie.

Badania dyfuzji, prowadzone już w XVIII wieku, doprowadziły do sformułowania elementarnych liniowych równań o stałych współczynnikach opisujących dyfuzję w ciałach stałych: Laplace’a (1782), Poissona (1813), Fouriera (1822) i Ficka (1855). Wraz z rozwojem teorii i postępem badań eksperymentalnych równania te uogólniano poprzez dodawanie nowych członów, często nieliniowych, uzmiennianie współczynników, dodawanie nowych równań, wprowadzanie obszarów o złożonej strukturze, tak aby coraz dokładniej modelowały realne zjawiska fizyczne.

Podstawowymi prawami opisującymi dyfuzję są prawa Ficka [29]. Pierwsze prawo Ficka stwierdza, że strumień cząstek dyfuzji i -tego składnika jest proporcjonalny do ujemnego gradientu stężenia tego składnika, co zapisuje się wzorem

$$J_i = -D_i \nabla c_i. \quad (1)$$

Wielkość D_i nazywana jest współczynnikiem dyfuzji i wyznaczana jest eksperymentalnie. Drugie prawo Ficka orzeka, że zmiana stężenia i -tego składnika w czasie jest minus dywergencją strumienia odpowiadającego temu składnikowi, tzn. że

$$\partial_t c_i = -\operatorname{div} J_i. \quad (2)$$

Relacja (2) nazywana jest równaniem ciągłości. Równanie to jest w istocie lokalnym prawem zachowania. W wyniku rozważań teoretycznych i przeprowadzonych eksperymentów laboratoryjnych okazało się, że dla wyjaśnienia pewnych zjawisk zachodzących w układach dyfundujących substancji należy „wzbogacić” strumień poprzez dodanie odpowiedniego członu [21, 23, 71, 74] lub zdefiniować go za pomocą równania różniczkowego [45, 58], generowanych przez dodatkowy niedyfuzyjny transport. Napiszę o tym dokładniej w dalszych częściach niniejszej rozprawy.

1.2 Cel rozprawy

Jako osiągnięcie naukowe do uzyskania stopnia naukowego doktora habilitowanego przedkładam cykl dziewięciu publikacji [A1] - [A9]. Rozważam trzy konkretne modele dyfuzji oraz sytuację ogólną:

- dyfuzyjny transport masy w materiałach stałych,
- elektrodyfuzję w jonowych selektywnych elektrodach i biologicznych kanałach jonowych,
- przepływ prądu jonowego w neuronach,
- inne lokalne i nielocalne modele dyfuzji.

Modele te opisane są nieliniowymi równaniami różniczkowymi cząstkowymi lub układami takich równań typu parabolicznego, paraboliczno-eliptycznego i hiperbolicznego wraz z warunkami początkowo-brzegowymi i początkowymi. Badam sytuację jedno- i wielowymiarową, lokalną i nielokalną. Główne wyniki koncentrują się na konstrukcji nowych modeli lub uogólnieniu już istniejących, np. poprzez uwzględnienie dodatkowego prawa fizycznego, zaproponowanie bardziej fizycznych warunków brzegowych albo osłabienie założeń, oraz na dowodzie twierdzeń o istnieniu i własnościach rozwiązań klasycznych lub słabych w odpowiednich przestrzeniach

Sobolewa, a także na konstrukcji metod numerycznych (metody różnicowe, metoda Galerkina) i na dowodzie twierdzeń dotyczących ich własności.

Wyniki osiągnięcia naukowego omówię w czterech kolejnych rozdziałach. Każdy rozdział zaczynam od przedstawienia rysu historycznego, później konstruuje modele matematyczne lub podaję przykłady takich modeli i dalej omawiam konkretne artykuły w kontekście czysto matematycznym, tj. krótko przedstawiam wyniki, formułuję główne twierdzenia i skrótowo prezentuję ideę dowodów. Żeby nadmiernie nie wydłużać prezentacji, nie formułuję twierdzeń pomocniczych i lematów, na ogół nietrywialnie dowiedzionych, a jedynie wspominam o nich przy okazji omawiania artykułów. Ze względu na różnorodność tematyki, oznaczenia w poszczególnych pracach są na ogół różne. Ponieważ Czytelnik z pewnością będzie chciał uzupełnić poniższe streszczenia lekturą artykułów, będę stosował oznaczenia w miarę możliwości oryginalne, co ułatwi głębszą analizę.

Pozostałe osiągnięcia naukowo-badawcze, niewchodzące w skład cyklu, omówię w ostatnim rozdziale.

2 Dyfuzja wzajemna w ciałach stałych, [A6], [A7], [A8]

Zacznę od konstrukcji modeli matematycznych. Ilościowy opis dyssypatywnego transportu masy jest szczególnie ważny w inżynierii materiałowej i hydrodynamicie. Transport w płynach wieloskładnikowych opisany jest układem równań Naviera-Stokesa z warunkiem początkowym i różnymi warunkami brzegowymi [24]. Procesu dyfuzji w ciałach stałych nie można opisywać układem Naviera-Stokesa, gdyż w tym przypadku nie ma przede wszystkim technicznych możliwości efektywnego wyznaczenia współczynników lepkości, występuje wiele faz, warstwa dyfundująca jest bardzo cienka i nie ma dużych strumieni masy, co implikuje wykluczenie członu konwekcyjnego. Przez dyfuzję wzajemną rozumiemy transport w układzie wieloskładnikowym, gdy wszystkie składniki wzajemnie w sobie dyfundują. Próbę matematycznego modelowania dyfuzji wzajemnej w wieloskładnikowych ciałach stałych zapoczątkował Darken [21] w 1948 roku. Autor ten rozważał fizycznie zamkniętą próbkę dwuskładnikową o znanym stałym stężeniu

$$c_1 + c_2 = c \quad (3)$$

i założył, że wymiana masy odbywa się tylko w jednym kierunku. Symbole c_1 , c_2 oznaczają stężenia pierwszego i drugiego składnika. Swoją model skonstruował w oparciu o równania ciągłości (2) dla strumieni, uwzględniając ruch ośrodka,

$$J_i = -D_i \partial_x c_i + c_i v^D, \quad i = 1, 2, \quad (4)$$

gdzie $D_i > 0$ są stałymi współczynnikami dyfuzji składników, zaś v^D jest tzw. prędkością dryftu. Dryft jest lokalną prędkością próbki względem układu odniesienia, którym może być brzeg. Drugą prędkością jest prędkość dyfuzyjna i -tego składnika określona wzorem $v_i^d := -D_i \partial_x (\ln c_i)$. Strumienie J_i nazywane są strumieniami Darkena, a opisana metoda nosi nazwę metody dwóch prędkości. Warto podkreślić, że J_i jest uogólnieniem strumienia Ficka (1). Wprowadzenie prędkości dryftu wyjaśnia ruch tzw. płaszczyzny Kirkendalla [77]. Jest to ruch powierzchni granicznej między, w tym przypadku, dwoma dyfundującymi ośrodkami w próbce. Teoretyczny opis efektu Kirkendalla ma ważne konsekwencje w zastosowaniach. Jedną z nich jest zapobieganie lub tłumienie powstawania pustych przestrzeni na granicy stopów z metalami nazywanych porowatością Kirkendalla. W ostatnim czasie prędkość dryftu wykorzystano również do opisu elektrodyfuzji w elektrochemii [83].

Jednowymiarowa metoda Darkena została uogólniona na przypadek wieloskładnikowy i zmodyfikowana do układu uogólnionych równań różniczkowych parabolicznych w miejsce układu różniczkowo-algebraicznego w latach dziewięćdziesiątych ubiegłego stulecia przez Danielewskiego, Bożka, Holly'ego i Filipka [19, 40]. Okazuje się, że zarówno analitycznie jak

i numerycznie układ taki bada się prościej. W pracy [A6] s -składnikowy odpowiednik równania (3) uogólniłem wraz ze współautorami, dopuszczając tzw. regułę Vegarda

$$\sum_{i=1}^s \Omega_i c_i = 1, \quad (5)$$

gdzie Ω_i oznaczają objętości molowe [82]. W ten sposób całkowite stężenie $c := \sum_{i=1}^s c_i$ może być zmienne w czasie i przestrzeni. W pracach [A7] i [A8] uogólniliśmy metodę Darkena na przypadek wielowymiarowy, formułując układ równań różniczkowych paraboliczno-eliptycznych.

Teraz przedstawię konstrukcję wspomnianych wyżej układów równań różniczkowych. Niech $\Omega \subset \mathbb{R}^n$, $n \in \mathbb{N}$ będzie otwartym i ograniczonym zbiorem z gładkim brzegiem $\partial\Omega$. Niech ponadto $T > 0$ będzie zadane. Współczynniki dyfuzji $D_i > 0$ są stałe lub zależą od stężeń, tj. $D_i = D_i(c_1, \dots, c_s)$. Rozważamy różniczkowo-algebraiczny układ (2), (5) ze strumieniami postaci (4) określony na zbiorze $[0, T] \times \overline{\Omega}$, przy czym $i = 1, \dots, s$. Zadajemy warunek początkowy

$$c_i(0, x) = c_{0i}(x), \quad x \in \Omega \quad (6)$$

i warunki brzegowe dla strumieni

$$J_i \cdot \mathbf{n} = j_i(t, x), \quad (t, x) \in [0, T] \times \partial\Omega, \quad (7)$$

gdzie $\mathbf{n}$ jest wektorem normalnym zewnętrznym do brzegu $\partial\Omega$, $i = 1, \dots, s$, zaś symbol „ $\cdot$ ” oznacza standardowy iloczyn skalarny w $\mathbb{R}^n$. Mnożymy równania (2) przez Ω_i , dodajemy stronami, korzystamy z reguły Vegarda (5) i otrzymujemy równanie ciągłości objętości (transportu objętości)

$$\operatorname{div} \left(\sum_{i=1}^s \Omega_i J_i(t, x) \right) = 0, \quad (t, x) \in [0, T] \times \overline{\Omega}. \quad (8)$$

Najpierw rozważmy przypadek jednowymiarowy, $n=1$. Niech $\Omega = (-\Lambda, \Lambda) \subset \mathbb{R}$. Z równania (8) wynika, że

$$\sum_{i=1}^s \Omega_i J_i(t, x) = K(t), \quad (t, x) \in [0, T] \times \overline{\Omega}, \quad (9)$$

gdzie $K : [0, T] \rightarrow \mathbb{R}$ jest dowolną funkcją. Związki (7), (9) implikują jednoznaczność funkcji K postaci

$$K(t) = \sum_{i=1}^s \Omega_i j_i(t, \Lambda) = - \sum_{i=1}^s \Omega_i j_i(t, -\Lambda), \quad t \in [0, T]. \quad (10)$$

Druga równość w relacji (10) jest w istocie założeniem na ewolucje brzegowe j_i . Z drugiej strony zależności (5), (7) generują tożsamość

$$\sum_{i=1}^s \Omega_i J_i(t, x) = - \sum_{i=1}^s \Omega_i D_i \partial_x c_i(t, x) + v^D(t, x), \quad (t, x) \in [0, T] \times \overline{\Omega}. \quad (11)$$

W konsekwencji obliczamy dryft

$$v^D(t, x) = \sum_{i=1}^s \Omega_i D_i \partial_x c_i(t, x) + K(t), \quad (t, x) \in [0, T] \times \overline{\Omega}. \quad (12)$$

W ten sposób otrzymujemy silnie sprzężony nieliniowy układ ewolucyjnych równań różniczkowych cząstkowych drugiego rzędu postaci

$$\partial_t c_i + \partial_x \left(-D_i \partial_x c_i + c_i \left(\sum_{k=1}^s \Omega_k D_k \partial_x c_k + K(t) \right) \right) = 0, \quad (t, x) \in [0, T] \times \Omega \quad (13)$$

z nieliniowymi sprzężonymi warunkami brzegowymi

$$-D_i \frac{\partial c_i}{\partial \mathbf{n}} + c_i \left(\sum_{k=1}^s \Omega_k D_k \frac{\partial c_k}{\partial \mathbf{n}} + K(t) \mathbf{n} \right) = j_i(t, x), \quad (t, x) \in [0, T] \times \partial\Omega, \quad (14)$$

$i = 1, \dots, s$. W dalszej części układ (13) będziemy nazywać, przy odpowiednim założeniu, uogólnionym układem parabolicznym.

Rozważmy przypadek wielowymiarowy, $n \geq 2$. Równanie ciągłości objętości (8) nie może teraz posłużyć do obliczenia dryftu dlatego, że nie implikuje niezależności pola wektorowego pod dywergencją od zmiennej przestrzennej x . Podkreślmy, że teraz dryft jest funkcją wektorową $v^D : [0, T] \times \bar{\Omega} \rightarrow \mathbb{R}^n$. Postulujemy, że dryft jest potencjalny, tzn. że istnieje skalarny potencjał $F : [0, T] \times \bar{\Omega} \rightarrow \mathbb{R}$ taki, że

$$v^D = -\nabla F. \quad (15)$$

Założenie o potencjalności dryftu jest fizycznie uzasadnione, ponieważ nawet powyżej temperatury Tammanna (2/3 temperatury topnienia) lepkość w ciałach stałych jest na tyle duża, że można przyjąć: $\text{rot} v^D = 0$. Postulat ten został też potwierdzony eksperymentalnie w pracach [A8] i [B16]. Podstawiając (15) do równań ciągłości (2) i równania ciągłości objętości (8), otrzymujemy silnie sprzężony nieliniowy układ paraboliczno-eliptyczny postaci

$$\begin{cases} \partial_t c_i + \text{div} \left(-D_i \nabla c_i - c_i \nabla F \right) = 0, & (t, x) \in [0, T] \times \Omega, \\ -\Delta F = \text{div} \left(\sum_{k=1}^s \Omega_k D_k \nabla c_k \right), & (t, x) \in [0, T] \times \Omega, \\ \int_{\Omega} F dx = 0, & t \in [0, T], \end{cases} \quad (16)$$

$i = 1, \dots, s$. Mnożymy definicję strumieni (4) przez Ω_i i $\mathbf{n}$, dodajemy stronami, korzystamy z reguły Vegarda (5) oraz relacji brzegowej (7) i mamy

$$\frac{\partial F}{\partial \mathbf{n}} = - \sum_{k=1}^s \Omega_k \left(D_k \frac{\partial c_k}{\partial \mathbf{n}} + j_k(t, x) \right), \quad (t, x) \in [0, T] \times \partial\Omega. \quad (17)$$

A stąd otrzymujemy nieliniowe sprzężone warunki brzegowe

$$\begin{cases} -D_i \frac{\partial c_i}{\partial \mathbf{n}} - c_i \frac{\partial F}{\partial \mathbf{n}} = j_i(t, x), & (t, x) \in [0, T] \times \partial\Omega, \\ \frac{\partial F}{\partial \mathbf{n}} = - \sum_{k=1}^s \Omega_k \left(D_k \frac{\partial c_k}{\partial \mathbf{n}} + j_k(t, x) \right), & (t, x) \in [0, T] \times \partial\Omega, \end{cases} \quad (18)$$

$i = 1, \dots, s$. Z twierdzenia Gaussa wynika warunek zgodności na ewolucje brzegowe j_i ,

$$\int_{\partial\Omega} \sum_{i=1}^s \Omega_i j_i(t, x) dS = 0, \quad t \in [0, T]. \quad (19)$$

Zarówno warunek brzegowy (14) jak i pierwszy warunek brzegowy w (18) można postrzeżać jako uogólnione nieliniowe warunki Robina na stężenia c_i . Z kolei drugi warunek brzegowy w (18) jest warunkiem Neumanna na potencjał F . Podkreślmy, że paraboliczno-eliptyczne zagadnienie początkowo-brzegowe (16), (6), (18) ma sens również w przypadku jednowymiarowym, $n = 1$ - uwaga 1 w [A7] oraz [A8]. Ponadto jest ono równoważne problemowi (13), (6), (14). Ze względu na silne sprzężenie, tj. przez drugie pochodne przestrzenne, układy (13) i (16) nie są badane w tak znanych monografiach jak [12, 14, 17, 22, 24, 28, 54, 75, 90].

[A6] W artykule tym udowodniliśmy twierdzenia 4.6, 5.1 o istnieniu, jednoznaczności i nieujemności globalnych w czasie słabych rozwiązań w odpowiednich przestrzeniach Sobolewa, jednowymiarowego nieliniowego problemu początkowo-brzegowego (13), (6), (14). Ponadto

w przypadku układu zamkniętego, gdy strumienie na brzegu $\partial\Omega$ są równe zeru, dowiedliśmy twierdzenie 6.1 o asymptotycznym zachowaniu rozwiązania. Twierdzenie to interpretuje się tak, że układ fizyczny w granicy, tj. przy t zmierzającym do plus nieskończoności, homogenizuje się.

Niech $\varrho_i = M_i c_i$, $\Theta_i = D_i$, $j_{i,L} = -j_{(\cdot, -\Lambda)}$, $j_{i,R} = j_{(\cdot, \Lambda)}$ oznaczają odpowiednio, gęstości, współczynniki dyfuzji składników i ewolucję strumieni na brzegu przedziału $\Omega = (-\Lambda, \Lambda) \subset \mathbb{R}$, gdzie $M_i > 0$ są masami molowymi składników. Teraz zagadnienie różniczkowe (13), (6), (14) będzie mieć postać

$$\partial_t \varrho_i + \partial_x \left(-\Theta_i \partial_x \varrho_i + \varrho_i \left(\sum_{j=1}^s \frac{\Omega_j \Theta_j}{M_j} \partial_x \varrho_j + K(t) \right) \right) = 0, \quad (t, x) \in [0, T] \times \Omega, \quad (20)$$

$$\varrho_i(0, x) = \varrho_{0i}(x), \quad x \in \Omega, \quad (21)$$

$$\begin{cases} -\Theta_i \partial_x \varrho_i + \varrho_i \left(\sum_{j=1}^s \frac{\Omega_j \Theta_j}{M_j} \partial_x \varrho_j + K(t) \right) = j_{i,L}(t), & (t, x) \in [0, T] \times \partial\Omega, \\ -\Theta_i \partial_x \varrho_i + \varrho_i \left(\sum_{j=1}^s \frac{\Omega_j \Theta_j}{M_j} \partial_x \varrho_j + K(t) \right) = j_{i,R}(t), & (t, x) \in [0, T] \times \partial\Omega, \end{cases} \quad (22)$$

$i = 1, \dots, s$. Całkowita masa i -tego składnika w ustalonej chwili $t \in [0, T]$ dana jest wzorem

$$m_i(t) = \int_{\Omega} \varrho_i(t, x) dx, \quad i = 1, \dots, s, \quad (23)$$

zaś wartość średnią lokalnego ułamka objętościowego $\Omega_i \varrho_i / M_i$ określamy formułą

$$\bar{m}_i(t) = \frac{1}{2\Lambda} \int_{\Omega} \Omega_i \frac{\varrho_i(t, x)}{M_i} dx, \quad i = 1, \dots, s. \quad (24)$$

Całkując (20) po przedziale Ω , korzystając z (23) i całkując jeszcze raz po przedziale $(0, t)$, otrzymujemy

$$m_i(t) = \int_{\Omega} \varrho_{0i}(x) dx + \int_0^t (j_{i,L}(\tau) - j_{i,R}(\tau)) d\tau \quad (25)$$

dla $t \in [0, T]$, $i = 1, \dots, s$. Zatem funkcje $\bar{m}_i$, $i = 1, \dots, s$ również można obliczyć. Niech

$$1^\perp = \{\xi = (\xi_1, \dots, \xi_s) \in \mathbb{R}^s : \xi_1 + \dots + \xi_s = 0\} \quad (26)$$

będzie przestrzenią wektorową ortogonalną do podprzestrzeni $\{\alpha 1 : \alpha \in \mathbb{R}\}$, gdzie $1 = (1, \dots, 1) \in \mathbb{R}^s$. Definiujemy przestrzenie Sobolewa

$$H = \left\{ f = (f_1, \dots, f_s) \in L^2(\Omega, 1^\perp) : \int_{\Omega} f_i(x) dx = 0, \quad i = 1, \dots, s \right\}, \quad (27)$$

$$V = \left\{ f \in H^1(\Omega, 1^\perp) : f \in H \right\}. \quad (28)$$

Normy w V i H generowane są przez iloczyny skalarne

$$(f, g)_V = \int_{\Omega} \partial_x f \cdot \partial_x g dx \quad f, g \in V, \quad (29)$$

$$(f, g)_H = \int_{\Omega} f \cdot g dx, \quad f, g \in H. \quad (30)$$

A stąd przestrzenie $V \subset H \subset V^*$ stanowią trójkę ewolucyjną z zanurzeniami gęstymi, ciągłymi i zwartymi [2], [90]. Niech

$$\mathcal{K} = \{\kappa = (\kappa_1, \dots, \kappa_s) \in \mathbb{R}^s : \kappa_1 + \dots + \kappa_s = 1, \quad \kappa_i \geq 0, \quad i = 1, \dots, s\}. \quad (31)$$

Definiujemy rodzinę operatorów liniowych

$$A_\kappa : 1^\perp \mapsto 1^\perp, \quad A_\kappa \xi = \sum_{i=1}^s \Theta_i(\kappa) \xi_i e_i - (\Theta(\kappa) \cdot \xi) \kappa \quad (32)$$

dla $\kappa \in \mathcal{K}$, gdzie $\xi \in 1^\perp$, $e_i = (0, \dots, 0, 1, 0, \dots, 0)$ z 1 na i -tej współrzędnej, $i = 1, \dots, s$. Przyjmujemy, że spełnione są następujące założenia.

Założenie H

$$(H_0) \quad \varrho_0(x) = (\varrho_{01}(x), \dots, \varrho_{0s}(x)) \geq 0 \text{ i } \sum_{i=1}^s \frac{\Omega_i \varrho_{0i}(x)}{M_i} = 1 \text{ dla } x \in \Omega.$$

$$(H_1) \quad \int_\Omega \varrho_{0i}(x) dx + \int_0^t (j_{i,L}(\tau) - j_{i,R}(\tau)) d\tau \geq 0 \text{ dla } t \in [0, T], i = 1, \dots, s.$$

$$(H_2) \quad \sum_{i=1}^s \frac{\Omega_i j_{i,L}(t)}{M_i} = \sum_{i=1}^s \frac{\Omega_i j_{i,R}(t)}{M_i} \text{ dla } t \in [0, T].$$

$$(H_3) \quad \varrho_0 \in L^2(\Omega).$$

$$(H_4) \quad j_{i,L}, j_{i,R} \in L^\infty(0, T), i = 1, \dots, s.$$

$$(H_5) \quad \Theta_i : \mathbb{R}^s \rightarrow \mathbb{R}_+, i = 1, \dots, s \text{ są lipschitzowskie i ograniczone.}$$

$$(H_6) \quad \text{Zachodzi warunek paraboliczności:}$$

$$\int_\Omega (A_g \partial_x f) \cdot \partial_x f dx \geq \mu \|f\|_V^2 - \nu \|f\|_H^2 \quad (33)$$

dla pewnych $\mu > 0$, $\nu \geq 0$ i dla wszystkich $f \in V$, $g = (g_1, \dots, g_r) \in H^1(\Omega, \mathbb{R}^r)$, $g_1 + \dots + g_s = 1$, $g_i \geq 0$, $i = 1, \dots, s$.

Z założeń (H_0) i (H_2) wynika zależność

$$\sum_{i=1}^s \bar{m}_i(t) = 1, \quad (34)$$

dzięki której możliwa jest zamiana zmiennych

$$w_i(t, x) = \frac{\Omega_i \varrho_i(t, x)}{M_i} - \bar{m}_i(t), \quad i = 1, \dots, s. \quad (35)$$

Położmy $w = (w_1, \dots, w_s)$ i $\bar{m} = (\bar{m}_1, \dots, \bar{m}_s)$. Dla dowolnie ustalonej funkcji $w \in L^2(0, T; V)$ i $t \in (0, T)$ symbolem $\langle \cdot, \cdot \rangle_{V^* \times V}$ oznaczamy liniowy ciągły funkcjonal postaci

$$\langle w'(t), v \rangle_{V^* \times V} = \sum_{i=1}^s \langle w'_i(t), v_i \rangle, \quad (36)$$

gdzie $\langle \cdot, \cdot \rangle$ jest liniowym ciągłym funkcjonalem określonym na przestrzeni $L^2(0, T; H^1(\Omega, \mathbb{R}))$, $v \in V$. Definiujemy jeszcze funkcje

$$\Gamma_{i,L}(t) = K(t) \bar{m}_i(t) - \frac{\Omega_i j_{i,L}}{M_i}, \quad i = 1, \dots, s, \quad (37)$$

$$\Gamma_{i,R}(t) = K(t) \bar{m}_i(t) - \frac{\Omega_i j_{i,R}}{M_i}, \quad i = 1, \dots, s,$$

$$\Gamma_L = (\Gamma_{1,L}, \dots, \Gamma_{r,L}),$$

$$\Gamma_R = (\Gamma_{1,R}, \dots, \Gamma_{r,R}),$$

$$\Gamma = (\Gamma_L, \Gamma_R),$$

dla $t \in [0, T]$. Rozważamy następującą słabą postać problemu początkowo-brzegowego (20)–(22).

Problem P. Znaleźć $w \in L^2(0, T; V)$ takie, że $w' \in L^2(0, T; V^*)$, dla p.w. $t \in (0, T)$ $w(t) + \overline{m}(t) \in \mathcal{K}$,

$$\begin{aligned} \langle w'(t), v \rangle_{V^* \times V} + \int_{\Omega} (A_{w(t) + \overline{m}(t)} \partial_x w(t)) \cdot \partial_x v dx - K(t) \int_{\Omega} w(t) \cdot \partial_x v dx \\ = \Gamma_R(t) \cdot v(\Lambda) - \Gamma_L(t) \cdot v(-\Lambda) \quad \text{dla każdego } v \in V, \end{aligned} \quad (38)$$

i spełniony jest warunek początkowy

$$w(0) = w_0. \quad (39)$$

Udowodniliśmy następujące twierdzenia.

Twierdzenie 1 ([A6], tw. 4.6). *Jeśli spełnione jest Założenie H, to Problem P ma rozwiązanie.*

Twierdzenie 2 ([A6], tw. 5.1). *Jeśli spełnione jest Założenie H, to Problem P ma w przestrzeni $L^4(0, T; V)$ co najwyżej jedno rozwiązanie.*

Twierdzenie 3 ([A6], tw. 6.1). *Niech $w : [0, \infty) \rightarrow H$ będzie rozwiązaniem Problemu P na każdym przedziale $[0, T]$ dla $T \in \mathbb{R}_+$. Jeśli spełnione jest Założenie H z $j_{i,L}(t) = j_{i,R} \equiv 0$, $t \in [0, \infty)$, $i = 1, \dots, s$ i $\nu = 0$ w (33), to $w \in L^2(0, \infty; V) \cap L^\infty(0, \infty; H)$, $w' \in L^2(0, \infty; V^*)$, funkcja $[0, \infty) \ni t \mapsto \|w(t)\|_H^2$ jest nierosnąca oraz $\lim_{t \rightarrow \infty} \|w(t)\|_H^2 = 0$.*

Twierdzenie 1 udowodniliśmy, wykorzystując metodę Galerkiną oraz własności rodziny automorfizmów A_κ , $\kappa \in \mathcal{K}$. Własności te są treścią uwagi 4.1 i lematów 4.2, 4.3. Ponadto skorzystaliśmy z twierdzenia Riesz–Fréchet’a, twierdzenia Picarda, twierdzenia Banacha–Alaoglu, lematu Gronwalla, lematu Aubina–Lionsa oraz własności przestrzeni Sobolewa, w szczególności z ciągłych i gęstych zanurzeń. Dowód twierdzenia 2 opiera się znowu na wspomnianych własnościach rodziny automorfizmów A_κ , $\kappa \in \mathcal{K}$ z wykorzystaniem nierówności Gronwalla, Höldera i Younga. W dowodzie twierdzenia 3 istotne jest użycie kryterium całkowitego zbieżności szeregów liczbowych. Warto jeszcze podkreślić, że w przypadku stałych współczynników dyfuzji Θ_i , warunek paraboliczności (33) można sprawdzać, wykorzystując lemat 3.5. Wspomniana rodzina automorfizmów była rozważana w [20].

[A7] W pracy skonstruowaliśmy niejawne metody różnicowe (FDM) dla nieliniowego paraboliczno–eliptycznego problemu początkowo–brzegowego (16), (6), (18) w przypadku jednowymiarowym, $n = 1$ i dwuwymiarowym, $n = 2$, przy założeniu, że współczynniki dyfuzji D_i są stałe. Przyjęliśmy też, że układ fizyczny jest zamknięty, tzn. że $j_i(t, x) \equiv 0$ dla $(t, x) \in [0, T] \times \partial\Omega$, ale to założenie można natychmiast uogólnić, dopuszczając układ fizyczny otwarty. Warto jeszcze zwrócić uwagę na fakt, że w postulatcie (15) jest znak „minus” i jest on fizycznie uzasadniony. Natomiast w tym artykule jest w tym miejscu znak „plus”, co fizycznie nie jest poprawne, ale matematycznie nie czyni żadnych problemów i rozumowania będą prawdziwe również dla znaku minus, przy czym w odpowiednich wzorach nastąpi wtedy zmiana znaku. Konstrukcja wspomnianych metod różnicowych opiera się na idei linearyzacji z rozdzieleniem na schematy różnicowe dla części eliptycznej i parabolicznej. Ponadto redukcja problemu różniczkowego z s do $(s - 1)$ równań parabolicznych pozwoliła na przeniesienie reguły Vegarda na rozwiązania dyskretne, co jest ważne zarówno z punktu widzenia matematyki jak i fizyki. Udowodniliśmy twierdzenie 1 o istnieniu i jednoznaczności rozwiązań niejawnych schematów różnicowych oraz twierdzenia 2, 3 o równoważności zbieżności skonstruowanych metod numerycznych ze względu na stężenia c_i i potencjał F (patrz uwagi 4, 6), w odpowiednich normach maksimum. Uwagi 5 i 6 implikują analogiczną równoważność stabilności.

W celu zobrazowania wyników opiszę jedynie przypadek jednowymiarowy, gdyż w przypadku dwuwymiarowym idea jest analogiczna, za to wzory są zdecydowanie bardziej rozbudowane, w szczególności pewne macierze stają się blokowe. Niech $\Omega = (-\Lambda, \Lambda) \subset \mathbb{R}$. Jak już wspomniałem, obliczając z reguły Vegarda (5)

$$c_s = \frac{1}{\Omega_s} \left(1 - \sum_{i=1}^{s-1} \Omega_i c_i \right), \quad (40)$$

problem różniczkowy (16), (6), (18) redukujemy do postaci

$$\begin{cases} \partial_t c_i = D_i \partial_{xx} c_i - \partial_x c_i \partial_x F - c_i \partial_{xx} F, & (t, x) \in [0, T] \times \Omega, \\ \partial_{xx} F = \sum_{k=1}^{s-1} \Omega_k (D_k - D_s) \partial_{xx} c_k, & (t, x) \in [0, T] \times \Omega, \\ \int_{\Omega} F dx = 0, & t \in [0, T], \end{cases} \quad (41)$$

$$c_i(0, x) = c_{0i}(x), \quad x \in \Omega, \quad (42)$$

$$\begin{cases} -D_i \partial_x c_i + c_i \sum_{k=1}^{s-1} \Omega_k (D_k - D_s) \partial_x c_k = 0, & (t, x) \in [0, T] \times \partial\Omega, \\ \partial_x F = \sum_{k=1}^{s-1} \Omega_k (D_k - D_s) \partial_x c_k, & (t, x) \in [0, T] \times \partial\Omega, \end{cases} \quad (43)$$

$i = 1, \dots, s-1$. Dyskretyzujemy prostokąt $[0, T] \times \bar{\Omega}$, definiując kroki siatki $h = 2\Lambda/(M+1)$, $\tau = T/K$, odpowiednio przestrzenny i czasowy, gdzie liczby $M, K \in \mathbb{N}$ są dowolnie zadane. Punkty dyskretne (t^μ, x_m) określamy następująco: $t^\mu = \mu\tau$, $x_m = -\Lambda + mh$, $\mu = 0, \dots, K$, $m = 0, \dots, M+1$. Do aproksymacji pochodnych wykorzystujemy ilorazy różnicowe centralne, przedni i wsteczny, a równanie całkowe aproksymujemy przy pomocy metody trapezów. Definiujemy niejawną schemat różnicowy dla części eliptycznej na potencjał $F^{\mu+1}$ oraz dla części parabolicznej na stężenia $c_i^{\mu+1}$ postaci

$$\begin{cases} -F_0^{\mu+1} + F_1^{\mu+1} = P_0^\mu(c) := \sum_{k=1}^{s-1} \Omega_k (D_k - D_s) (-c_{k,0}^\mu + c_{k,1}^\mu), \\ F_{m-1}^{\mu+1} - 2F_m^{\mu+1} + F_{m+1}^{\mu+1} = P_m^\mu(c) \\ \quad := \sum_{k=1}^{s-1} \Omega_k (D_k - D_s) (c_{k,m-1}^\mu - 2c_{k,m}^\mu + c_{k,m+1}^\mu), \\ F_M^{\mu+1} - F_{M+1}^{\mu+1} = P_{M+1}^\mu(c) := \sum_{k=1}^{s-1} \Omega_k (D_k - D_s) (c_{k,M}^\mu - c_{k,M+1}^\mu), \\ F_0^{\mu+1} + 2 \sum_{m=1}^M F_m^{\mu+1} + F_{M+1}^{\mu+1} = 0, \end{cases} \quad (44)$$

$$\begin{cases} q_{i,0}^\mu c_{i,0}^{\mu+1} + q_{i,1}^\mu c_{i,1}^{\mu+1} = Q_{i,0}^\mu := 0, \\ d_{i,m-1}^\mu c_{i,m-1}^{\mu+1} + v_{i,m}^\mu c_{i,m}^{\mu+1} + u_{i,m+1}^\mu c_{i,m+1}^{\mu+1} = Q_{i,m}^\mu := e_{i,m}^\mu c_{i,m}^\mu, \\ q_{i,M}^\mu c_{i,M}^{\mu+1} + q_{i,M+1}^\mu c_{i,M+1}^{\mu+1} = Q_{i,M+1}^\mu := 0, \end{cases} \quad (45)$$

gdzie

$$\begin{aligned} \kappa &= \frac{\tau}{h^2}, \\ v_{i,m}^\mu &= 1 + 2\kappa D_i, \\ d_{i,m-1}^\mu &= -\kappa D_i - \frac{1}{4}\kappa (F_{m+1}^{\mu+1} - F_{m-1}^{\mu+1}), \\ u_{i,m+1}^\mu &= -\kappa D_i + \frac{1}{4}\kappa (F_{m+1}^{\mu+1} - F_{m-1}^{\mu+1}), \\ e_{i,m}^\mu &= 1 - \kappa (F_{m-1}^{\mu+1} - 2F_m^{\mu+1} + F_{m+1}^{\mu+1}), \\ q_{i,0}^\mu &= q_{i,M+1}^\mu = D_i, \\ q_{i,1}^\mu &= -D_i + \sum_{k=1}^{s-1} \Omega_k (D_k - D_s) (c_{k,1}^\mu - c_{k,0}^\mu), \\ q_{i,M}^\mu &= -D_i + \sum_{k=1}^{s-1} \Omega_k (D_k - D_s) (c_{k,M}^\mu - c_{k,M+1}^\mu), \end{aligned}$$

dla $m = 1, \dots, M$, $i = 1, \dots, s - 1$ oraz $\mu = 0, \dots, K - 1$. Jeśli $v_{i,m}^{\mu(m)} \neq 0$, to przeprowadzamy eliminację Gaussa dla schematu (45):

$$\begin{aligned}
v_{i,k}^{\mu(0)} &= q_{i,k}^\mu, \quad k = 0, 1, \\
v_{i,m}^{\mu(m)} &= v_{i,m}^\mu - d_{i,m-1}^\mu \left(v_{i,m-1}^{\mu(m-1)} \right)^{-1} v_{i,m}^{\mu(m-1)}, \quad v_{i,m-1}^{\mu(m)} = 0, \quad v_{i,m+1}^{\mu(m)} = u_{i,m+1}^\mu, \\
v_{i,M+1}^{\mu(M+1)} &= q_{i,M+1}^\mu - q_{i,M}^\mu \left(v_{i,M}^{\mu(M)} \right)^{-1} v_{i,M+1}^{\mu(M)}, \quad v_{i,M}^{\mu(M+1)} = 0, \\
Q_{i,0}^{\mu(0)} &= Q_{i,0}^\mu, \\
Q_{i,m}^{\mu(m)} &= Q_{i,m}^\mu - d_{i,m-1}^\mu \left(v_{i,m-1}^{\mu(m-1)} \right)^{-1} Q_{i,m-1}^{\mu(m-1)}, \\
Q_{i,M+1}^{\mu(M+1)} &= Q_{i,M+1}^\mu - q_{i,M}^\mu \left(v_{i,M}^{\mu(M)} \right)^{-1} Q_{i,M}^{\mu(M)},
\end{aligned} \tag{46}$$

$m = 1, \dots, M$, $i = 1, \dots, s - 1$.

Twierdzenie 4 ([A7], tw. 1).

(i) Dla dowolnych kroków h, τ układ (44) ma dokładnie jedno rozwiązanie $F^{\mu+1}$ przy zadanych $(c_1^\mu, \dots, c_{s-1}^\mu)$ postaci

$$F_{M+1}^{\mu+1} = \frac{\sum_{k=1}^{s-1} \Omega_k(D_k - D_s) \left[-c_{k,0}^\mu - 2 \sum_{l=1}^M c_{k,l}^\mu + (1 + 2M)c_{k,M+1}^\mu \right]}{2(M+1)}, \tag{47}$$

$$F_m^{\mu+1} = F_{m+1}^{\mu+1} - \sum_{k=1}^{s-1} \Omega_k(D_k - D_s) (c_{k,m+1}^\mu - c_{k,m}^\mu), \quad m = M, \dots, 0.$$

(ii) Układ (45) ma dokładnie jedno rozwiązanie $(c_1^{\mu+1}, \dots, c_{s-1}^{\mu+1})$ przy zadanych $(c_1^\mu, \dots, c_{s-1}^\mu)$ oraz $F^{\mu+1}$ wtedy i tylko wtedy, gdy kroki h, τ są tak małe, że $v_{i,m}^{\mu(m)} \neq 0$, $m = 0, \dots, M + 1$, $i = 1, \dots, s - 1$. Rozwiązanie to dane jest wzorem

$$\begin{aligned}
c_{i,M+1}^{\mu+1} &= \left(v_{i,M+1}^{\mu(M+1)} \right)^{-1} Q_{i,M+1}^{\mu(M+1)}, \\
c_{i,m}^{\mu+1} &= \left(v_{i,m}^{\mu(m)} \right)^{-1} \left(Q_{i,m}^{\mu(m)} - v_{i,m+1}^{\mu(m)} c_{i,m+1}^{\mu+1} \right), \quad m = M, \dots, 0,
\end{aligned} \tag{48}$$

dla $i = 1, \dots, s - 1$.

Niech (c, F) , $c = (c_1, \dots, c_{s-1})$ będzie rozwiązaniem problemu różniczkowego (41)–(43) i niech (w, G) , $w = (w_1, \dots, w_{s-1})$ będzie rozwiązaniem schematów różnicowych (44), (45). Definiujemy błędy metody różnicowej

$$r = c - w, \quad R = F - G, \tag{49}$$

normy maksimum

$$\begin{aligned}
\|r\|_0 &= \max \left\{ |r_{i,m}^\mu| : \mu = 0, \dots, K, \ i = 1, \dots, s - 1, \ m = 0, \dots, M + 1 \right\}, \\
\|R\|_0 &= \max \left\{ |R_m^\mu| : \mu = 1, \dots, K, \ m = 0, \dots, M + 1 \right\}
\end{aligned} \tag{50}$$

oraz seminormy

$$\|r\|_{(\mu)} = \max \left\{ |r_{i,m}^{\tilde{\mu}}| : \tilde{\mu} = 0, \dots, \mu, \ i = 1, \dots, s - 1, \ m = 0, \dots, M + 1 \right\}, \tag{51}$$

gdzie $\mu = 0, \dots, K$. Definiujemy również ilorazy różnicowe

$$\begin{aligned}\delta^+ r_{i,m}^\mu &= \frac{r_{i,m+1}^\mu - r_{i,m}^\mu}{h}, \\ \delta^- r_{i,m}^\mu &= \frac{r_{i,m}^\mu - r_{i,m-1}^\mu}{h}, \\ \delta r_{i,m}^\mu &= \frac{r_{i,m+1}^\mu - r_{i,m-1}^\mu}{2h}, \\ \delta^{(2)} r_{i,m}^\mu &= \frac{r_{i,m-1}^\mu - 2r_{i,m}^\mu + r_{i,m+1}^\mu}{h^2}\end{aligned}\tag{52}$$

i analogicznie $\delta R_m^\mu, \delta^{(2)} R_m^\mu$. Wprowadzamy jeszcze seminormy

$$\begin{aligned}\|\delta r\|_0 &= \max \left\{ |\delta r_{i,m}^\mu| : \mu = 0, \dots, K, i = 1, \dots, s-1, m = 1, \dots, M \right\}, \\ \|\delta^{(2)} r\|_0 &= \max \left\{ |\delta^{(2)} r_{i,m}^\mu| : \mu = 0, \dots, K, i = 1, \dots, s-1, m = 1, \dots, M \right\}, \\ \|\delta R\|_0 &= \max \left\{ |\delta R_m^\mu| : \mu = 1, \dots, K, m = 1, \dots, M \right\}, \\ \|\delta^{(2)} R\|_0 &= \max \left\{ |\delta^{(2)} R_m^\mu| : \mu = 1, \dots, K, m = 1, \dots, M \right\}\end{aligned}\tag{53}$$

oraz normy maksimum

$$\begin{aligned}\|r\|_1 &= \|r_0\| + \|\delta r\|_0, \\ \|r\|_2 &= \|r_0\| + \|\delta r\|_0 + \|\delta^{(2)} r\|_0, \\ \|R\|_1 &= \|R_0\| + \|\delta R\|_0, \\ \|R\|_2 &= \|R_0\| + \|\delta R\|_0 + \|\delta^{(2)} R\|_0.\end{aligned}\tag{54}$$

Twierdzenie 5 ([A7], tw. 2). Załóżmy, że $(c, F) \in C^{1,2}([0, T] \times \overline{\Omega}, \mathbb{R}^{s-1})$, $c = (c_1, \dots, c_{s-1})$ jest rozwiązaniem (41)–(43) i (w, G) , $w = (w_1, \dots, w_{s-1})$ jest rozwiązaniem (44), (45). Wówczas istnieją funkcje rzeczywiste $\alpha_i(\tau, h)$, $i = 0, 1, 2$ takie, że

$$\begin{aligned}\|R\|_0 &\leq 2 \sum_{k=1}^{s-1} \Omega_k |D_k - D_s| \|r\|_0 + \alpha_0(\tau, h), \\ \|\delta R\|_0 &\leq \sum_{k=1}^{s-1} \Omega_k |D_k - D_s| \|\delta r\|_0 + \alpha_1(\tau, h), \\ \|\delta^{(2)} R\|_0 &\leq \sum_{k=1}^{s-1} \Omega_k |D_k - D_s| \|\delta^{(2)} r\|_0 + \alpha_2(\tau, h)\end{aligned}\tag{55}$$

oraz $\lim_{(\tau, h) \rightarrow (0, 0)} \alpha_i(\tau, h) = 0$, $i = 0, 1, 2$.

Twierdzenie 6 ([A7], tw. 3). Załóżmy, że $(c, F) \in C^{1,2}([0, T] \times \overline{\Omega}, \mathbb{R}^{s-1})$, $c = (c_1, \dots, c_{s-1})$ jest rozwiązaniem (41)–(43) i (w, G) , $w = (w_1, \dots, w_{s-1})$ jest rozwiązaniem (44), (45). Ponadto

$$|\delta G_m^\mu| \leq A, \quad |\delta^{(2)} G_m^\mu| \leq B, \quad |\delta^+ w_{i,0}^\mu|, \quad |\delta^- w_{i,M+1}^\mu| \leq C,\tag{56}$$

$$Ah \leq 2D_i, \quad \frac{h}{\tau} \leq D, \quad \lim_{(\tau, h) \rightarrow (0, 0)} \frac{h}{\tau} = 0,\tag{57}$$

$i = 1, \dots, s-1$, $m = 1, \dots, M$, $\mu = 0, \dots, K$, gdzie $A, C, D \geq 0$, $B > 0$. Wówczas istnieje funkcja rzeczywista $\beta(\tau, h)$ i stała $d \geq 0$ takie, że

$$\|r\|_0 \leq \frac{e^{LT} - 1}{L} \left[\left(1 + h \frac{C}{D_i} \sum_{k=1}^{s-1} \Omega_k |D_k - D_s| \right) d \left(\|\delta R\|_0 + \|\delta^{(2)} R\|_0 \right) + \beta(\tau, h) \right]\tag{58}$$

oraz $\lim_{(\tau, h) \rightarrow (0, 0)} \beta(\tau, h) = 0$, gdzie $L = \frac{CD}{D_i} \sum_{k=1}^{s-1} \Omega_k |D_k - D_s| + \left(1 + 2\Lambda \frac{C}{D_i} \sum_{k=1}^{s-1} \Omega_k |D_k - D_s| \right) B$.

Dowód twierdzenia 4 opiera się na metodzie eliminacji Gaussa. Twierdzenie 5 wykazuje się, korzystając ze wzoru na błąd $R^{\mu+1}$, który znajduje się trochę podobnie, jak wzór na $F^{\mu+1}$ w twierdzeniu 4. Uzasadnienie twierdzenia 6 wymaga bardziej zaawansowanej techniki, a mianowicie trzeba skorzystać z rekurencyjnej nierówności dla seminorm $\|r\|_{(\mu)}$ i $\|r\|_{(\mu+1)}$ z warunkiem początkowym $\|r\|_{(0)} = 0$. Technikę tę zaczerpnąłem z prac [A1], [A5], których treść omówię w dalszej części.

[A8] W tym artykule metody różnicowe opracowane w [A7] uogólniliśmy na przypadek współczynników dyfuzji D_i zależnych nieliniowo od stężeń $c_1, \dots, c_s$, tj. $D_i = D_i(N_i)$, gdzie $N_i = c_i / (\sum_{k=1}^s c_k)$ jest ułamkiem molowym. Tutaj postulat (15) jest już w pełni fizycznie uzasadniony, tzn. ze znakiem „minus”. Udowodniliśmy twierdzenie 1 o istnieniu i jednoznaczności rozwiązań niejawnych schematów różnicowych oraz twierdzenie 2 o zgodności i asymptotyce błędu (patrz uwaga 4). To ostatnie twierdzenie jest istotne, ponieważ zastosowana aproksymacja nieliniowych współczynników D_i jest dość subtelna. W pracy opisaliśmy ponadto eksperyment przeprowadzony w laboratorium z trójskładnikową próbką żelaza, kobaltu i niklu, rozważając sytuację dwuwymiarową oraz porównaliśmy wyniki tego eksperymentu z symulacjami numerycznymi. Stosując metodę z pracy [88], wyznaczyliśmy również współczynniki dyfuzji D_i rozważanych trzech pierwiastków, jako funkcje wykładnicze ułamków molowych. Współczynniki te nie są stabilizowane i zależą m.in. od składu procentowego próbki i temperatury. Wniosek jest taki, że zaproponowany model matematyczny z układem paraboliczno-eliptycznym oraz metoda różnicowa bardzo dobrze opisują sytuację fizyczną. Eksperyment ten jeszcze dokładniej, w wielu aspektach, opisaliśmy w [B16]. Warto podkreślić, że zarówno model jak i konstrukcję metody różnicowej można uogólnić na przypadek trójwymiarowy. Jednak przeprowadzenie odpowiedniego eksperymentu w laboratorium jest technicznie skomplikowane. Obecnie nad nim pracujemy wspólnie z badaczami z Wydziału Inżynierii Materiałowej i Ceramiki AGH.

Do opisu metody różnicowej skupię się na sytuacji jednowymiarowej, gdyż w przypadku dwuwymiarowym idea jest podobna. Niech $\Omega = (-\Lambda, \Lambda) \subset \mathbb{R}$. Postępując analogicznie jak w [A7], problem różniczkowy (16), (6), (18) redukujemy do postaci

$$\begin{cases} \partial_t c_i = \partial_x (D_i(N_i) \partial_x c_i) + \partial_x c_i \partial_x F + c_i \partial_{xx} F, & (t, x) \in [0, T] \times \Omega, \\ -\partial_{xx} F = \sum_{k=1}^{s-1} \Omega_k \partial_x \left((D_k(N_k) - D_s(N_s)) \partial_x c_k \right), & (t, x) \in [0, T] \times \Omega, \\ \int_{\Omega} F dx = 0, & t \in [0, T], \end{cases} \quad (59)$$

$$c_i(0, x) = c_{0i}(x), \quad x \in \Omega, \quad (60)$$

$$\begin{cases} -D_i(N_i) \partial_x c_i + c_i \sum_{k=1}^{s-1} \Omega_k (D_k(N_k) - D_s(N_s)) \partial_x c_k = 0, & (t, x) \in [0, T] \times \partial\Omega, \\ \partial_x F = -\sum_{k=1}^{s-1} \Omega_k (D_k(N_k) - D_s(N_s)) \partial_x c_k, & (t, x) \in [0, T] \times \partial\Omega, \end{cases} \quad (61)$$

$i = 1, \dots, s-1$, co znowu pozwoliło na przeniesienie reguły Vegarda na rozwiązania dyskretne (patrz uwagi 3, 4). Zastosowaliśmy modyfikację metody, która oprócz punktów siatki zdefiniowanych w [A7] wykorzystuje jeszcze punkty połówkowe $x_{m+\frac{1}{2}} = -\Lambda + (m + \frac{1}{2})h$, $m = 1, \dots, M$ [59]. Człony $\partial_x (D_i(N_i) \partial_x c_i)$ w (59) aproksymujemy w punkcie (t^μ, x_m) ilorazami różnicowymi

$$\frac{1}{h} \left(D_{i, m+\frac{1}{2}}^\mu \frac{1}{h} (c_{i, m+1}^{\mu+1} - c_{i, m}^{\mu+1}) - D_{i, m-\frac{1}{2}}^\mu \frac{1}{h} (c_{i, m}^{\mu+1} - c_{i, m-1}^{\mu+1}) \right),$$

gdzie

$$\begin{aligned} D_{i, m-\frac{1}{2}}^\mu &= D_i \left(\frac{1}{2} (N_{i, m-1}^\mu + N_{i, m}^\mu) \right), \\ D_{i, m+\frac{1}{2}}^\mu &= D_i \left(\frac{1}{2} (N_{i, m}^\mu + N_{i, m+1}^\mu) \right), \end{aligned}$$

dla $m = 1, \dots, M$. Analogicznie aproksymujemy człony $\partial_x \left((D_k(N_k) - D_s(N_s)) \partial_x c_k \right)$, przy czym stężenia rozważamy na poziomie t^μ zamiast $t^{\mu+1}$. Do aproksymacji pozostałych pochodnych wykorzystujemy ilorazy różnicowe centralne, przedni i wsteczny, a równanie całkowe przybliżamy przy pomocy metody trapezów. Ponadto człony $D_i(N_i)$ w pierwszych $(s-1)$ warunkach brzegowych w (61) aproksymujemy liczbami

$$D_{i,m}^\mu = D_i(N_{i,m}^\mu)$$

dla $m = 0, M+1$ i podobnie $D_k(N_k)$, $D_s(N_s)$. Ale człony $D_k(N_k)$, $D_s(N_s)$ w ostatnim warunku brzegowym w (61) aproksymujemy liczbami $D_{k,\frac{1}{2}}^\mu$, $D_{s,\frac{1}{2}}^\mu$, $D_{k,M+\frac{1}{2}}^\mu$, $D_{s,M+\frac{1}{2}}^\mu$. Definiujemy niejawną schemat różnicowy dla części eliptycznej na potencjał $F^{\mu+1}$ oraz dla części parabolicznej na stężenia $c_i^{\mu+1}$ postaci

$$\begin{cases} F_0^{\mu+1} - F_1^{\mu+1} = P_0^\mu := \sum_{k=1}^{s-1} \Omega_k (D_{k,\frac{1}{2}}^\mu - D_{s,\frac{1}{2}}^\mu) (c_{k,1}^\mu - c_{k,0}^\mu), \\ -F_{m-1}^{\mu+1} + 2F_m^{\mu+1} - F_{m+1}^{\mu+1} = P_m^\mu := \sum_{k=1}^{s-1} \Omega_k \left((D_{k,m-\frac{1}{2}}^\mu - D_{s,m-\frac{1}{2}}^\mu) c_{k,m-1}^\mu \right. \\ \left. - (D_{k,m+\frac{1}{2}}^\mu - D_{s,m+\frac{1}{2}}^\mu + D_{k,m-\frac{1}{2}}^\mu - D_{s,m-\frac{1}{2}}^\mu) c_{k,m}^\mu \right. \\ \left. + (D_{k,m+\frac{1}{2}}^\mu - D_{s,m+\frac{1}{2}}^\mu) c_{k,m+1}^\mu \right), \\ -F_M^{\mu+1} + F_{M+1}^{\mu+1} = P_{M+1}^\mu := \sum_{k=1}^{s-1} \Omega_k (D_{k,M+\frac{1}{2}}^\mu - D_{s,M+\frac{1}{2}}^\mu) (c_{k,M}^\mu - c_{k,M+1}^\mu), \\ F_0^{\mu+1} + 2 \sum_{m=1}^M F_m^{\mu+1} + F_{M+1}^{\mu+1} = 0, \end{cases} \quad (62)$$

$$\begin{cases} q_{i,0}^\mu c_{i,0}^{\mu+1} + q_{i,1}^\mu c_{i,1}^{\mu+1} = Q_{i,0}^\mu := 0, \\ d_{i,m-1}^\mu c_{i,m-1}^{\mu+1} + v_{i,m}^\mu c_{i,m}^{\mu+1} + u_{i,m+1}^\mu c_{i,m+1}^{\mu+1} = Q_{i,m}^\mu := e_{i,m}^\mu c_{i,m}^\mu, \\ q_{i,M}^\mu c_{i,M}^{\mu+1} + q_{i,M+1}^\mu c_{i,M+1}^{\mu+1} = Q_{i,M+1}^\mu := 0, \end{cases} \quad (63)$$

gdzie

$$\begin{aligned} \kappa &= \frac{\tau}{h^2}, \\ v_{i,m}^\mu &= 1 + \kappa \left(D_{i,m+\frac{1}{2}}^\mu + D_{i,m-\frac{1}{2}}^\mu \right), \\ d_{i,m-1}^\mu &= \kappa \left(-D_{i,m-\frac{1}{2}}^\mu + \frac{1}{4} (F_{m+1}^{\mu+1} - F_{m-1}^{\mu+1}) \right), \\ u_{i,m+1}^\mu &= \kappa \left(-D_{i,m+\frac{1}{2}}^\mu - \frac{1}{4} (F_{m+1}^{\mu+1} - F_{m-1}^{\mu+1}) \right), \\ e_{i,m}^\mu &= 1 + \kappa \left(F_{m+1}^{\mu+1} - 2F_m^{\mu+1} + F_{m-1}^{\mu+1} \right), \\ q_{i,1}^\mu &= -D_{i,0}^\mu + \sum_{k=1}^{s-1} \Omega_k (D_{k,0}^\mu - D_{s,0}^\mu) (c_{k,1}^\mu - c_{k,0}^\mu), \\ q_{i,M}^\mu &= -D_{i,M+1}^\mu + \sum_{k=1}^{s-1} \Omega_k (D_{k,M+1}^\mu - D_{s,M+1}^\mu) (c_{k,M}^\mu - c_{k,M+1}^\mu), \\ q_{i,0}^\mu &= D_{i,0}^\mu, \\ q_{i,M+1}^\mu &= D_{i,M+1}^\mu, \end{aligned}$$

dla $m = 1, \dots, M$, $i = 1, \dots, s-1$ oraz $\mu = 0, \dots, K-1$. Jeśli $v_{i,m}^{\mu(m)} \neq 0$, to przeprowadzamy eliminację Gaussa dla schematu (63) przy pomocy takich samych wzorów jak w (46).

Twierdzenie 7 ([A8], tw. 1).

(i) Dla dowolnych kroków h, τ układ (62) ma dokładnie jedno rozwiązanie $F^{\mu+1}$ przy zadanych $(c_1^\mu, \dots, c_{s-1}^\mu)$ postaci

$$F_{M+1}^{\mu+1} = \frac{\sum_{k=1}^{s-1} \Omega_k \left[(D_{k, \frac{1}{2}}^\mu - D_{s, \frac{1}{2}}^\mu) c_{k,0}^\mu + \sum_{l=1}^M \left((2l+1)(D_{k, l+\frac{1}{2}}^\mu - D_{s, l+\frac{1}{2}}^\mu) \right. \right.}{2(M+1)} \quad (64)$$

$$\left. \left. - (2l-1)(D_{k, l-\frac{1}{2}}^\mu - D_{s, l-\frac{1}{2}}^\mu) \right) c_{k,l}^\mu - (1+2M)(D_{k, M+\frac{1}{2}}^\mu - D_{s, M+\frac{1}{2}}^\mu) c_{k, M+1}^\mu \right],$$

$$F_m^{\mu+1} = F_{m+1}^{\mu+1} + \sum_{k=1}^{s-1} \Omega_k (D_{k, m+\frac{1}{2}}^\mu - D_{s, m+\frac{1}{2}}^\mu) (c_{k, m+1}^\mu - c_{k, m}^\mu), \quad m = M, \dots, 0.$$

(ii) Układ (63) ma dokładnie jedno rozwiązanie $(c_1^{\mu+1}, \dots, c_{s-1}^{\mu+1})$ przy zadanych $(c_1^\mu, \dots, c_{s-1}^\mu)$ oraz $F^{\mu+1}$ wtedy i tylko wtedy, gdy kroki h, τ są tak małe, że $v_{i,m}^{\mu(m)} \neq 0$, $m = 0, \dots, M+1$, $i = 1, \dots, s-1$. Rozwiązanie to dane jest wzorem

$$c_{i, M+1}^{\mu+1} = (v_{i, M+1}^{\mu(M+1)})^{-1} Q_{i, M+1}^{\mu(M+1)}, \quad (65)$$

$$c_{i, m}^{\mu+1} = (v_{i, m}^{\mu(m)})^{-1} (Q_{i, m}^{\mu(m)} - v_{i, m+1}^{\mu(m)} c_{i, m+1}^{\mu+1}), \quad m = M, \dots, 0,$$

dla $i = 1, \dots, s-1$.

Twierdzenie 8 ([A8], tw. 2). Załóżmy, że stężenia początkowe c_{0i} , $i = 1, \dots, s$ są takiej regularności, że rozwiązanie (c, F) problemu różniczkowego (59)–(61) należy do klasy $C^3([0, T] \times \bar{\Omega}, \mathbb{R}^s)$, $D_i \in C^2([0, 1], \mathbb{R}_+)$, $i = 1, \dots, s$ oraz $\sum_{k=1}^s c_k \geq \alpha > 0$ dla pewnego α . Wtedy metoda różnicowa (62), (63) jest zgodna, a błędy aproksymacji $r, R = O(\tau + h)$.

Dowód twierdzenia 7 opiera się na metodzie eliminacji Gaussa. Z kolei twierdzenie 8 uzasadnia się, wykorzystując wzór Taylora z resztą Lagrange’a.

3 Elektrodyfuzja, [A4], [A9]

Znowu zacznę od konstrukcji modeli matematycznych. Elektrodyfuzja to proces łączący dwa zjawiska: transport dyfuzyjny masy oraz transport ładunku elektrycznego. Ponieważ ładunki są zlokalizowane na jonach, to te dwa procesy dało się uwzględnić przez odpowiednią definicję strumienia masy i dołożenie równania na rozkład pola elektrycznego lub potencjału elektrycznego. Pierwszy model matematyczny opisujący elektrodyfuzję opracowali niezależnie od siebie Nernst [71] w 1889 roku i Planck [74] w 1890 roku. Model ten był później badany przez Debye’a i Hückela [23]. W literaturze jest on nazywany modelem Nernsta-Plancka-Poissona, modelem Poissona-Nernsta-Plancka lub czasami modelem Debye’a-Hückela. Transport i dyfuzja naładowanych elektrycznie cząstek (jonów, elektronów, dziur i koloidów) odgrywa ważną rolę w wielu dyscyplinach nauki i techniki, a szczególnie w elektrochemii, inżynierii elektrycznej i biomedycznej oraz medycynie. Szczegółowo jest to opisane w rozdziałach 1 w pracach [A4], [A9]. Wartym podkreślenia jest fakt, że Hodgkin i Huxley za odkrycia dotyczące mechanizmów jonowych związanych ze wzbudzeniem i hamowaniem w obwodowych i centralnych częściach błony komórkowej nerwu otrzymali w 1963 roku Nagrodę Nobla w dziedzinie fizjologii i medycyny [39]. Od wielu lat trwają intensywne badania mechanizmu transportu jonów różnych pierwiastków w tzw. kanałach jonowych zlokalizowanych w błonach komórkowych różnych komórek żywych organizmów. Jest kilka biologicznych teorii dotyczących tego zagadnienia, jednak żadna z nich

nie jest w pełni satysfakcjonująca. Sztucznym jednowymiarowym odpowiednikiem biologicznych kanałów jonowych są np. jonowe selektywne elektrody (ISE).

Podobnie jak w procesie dyfuzji wzajemnej masy w ciałach stałych, elektrodyfuzję opisuje się równaniami ciągłości (2). Strumienie są znowu uogólnieniem strumieni Ficka (1) i mają postać

$$J_i = -D_i \nabla c_i + u_i c_i E, \quad (66)$$

gdzie c_i oznaczają stężenia ładunków składników, $D_i > 0$ są stałymi współczynnikami dyfuzji składników, E jest natężeniem pola elektrycznego generowanego przez całkowity ładunek o gęstości $q = F \sum_{i=1}^s z_i c_i$ spełniającym relację

$$\operatorname{div} E = \frac{q}{\varepsilon_0 \varepsilon_r}, \quad (67)$$

F jest stałą Faradaya, z_i są wartościami ładunków składników, zaś ε_0 i ε_r to odpowiednio, stała dielektryczna próżni i względna stała dielektryczna ośrodka. Ponadto $u_i = D_i z_i F / (RT)$ jest ruchliwością składników, gdzie R to stała gazowa, zaś T jest ustaloną temperaturą ośrodka. Powyższy związek współczynników dyfuzji z ruchliwością nazywany jest relacją Einsteina-Smoluchowskiego. Strumienie J_i nazywane są strumieniami Nernsta-Plancka. W większości zastosowań pole elektryczne jest zastępowane potencjałem elektrycznym zgodnie z zależnością

$$E = -\nabla \varphi, \quad (68)$$

co po prostu stanowi, że pole elektryczne jest polem zachowawczym (jest to prawdą w przypadku braku pól magnetycznych). W ten sposób otrzymujemy silnie sprzężony nieliniowy układ paraboliczno-eliptyczny postaci

$$\begin{cases} \partial_t c_i + \operatorname{div} \left(-D_i \left(\nabla c_i + \alpha z_i c_i \nabla \varphi \right) \right) = 0, & (t, x) \in [0, T] \times \Omega, \\ -\Delta \varphi = \lambda \sum_{i=1}^s z_i c_i, & (t, x) \in [0, T] \times \Omega, \end{cases} \quad (69)$$

gdzie $\lambda = F / (\varepsilon_0 \varepsilon_r)$ jest stałą Debye'a, $\alpha = F / (RT)$, $i = 1, \dots, s$. W literaturze nosi on nazwę klasycznego układu Nernsta-Plancka-Poissona (cNPP) lub klasycznego układu Poissona-Nernsta-Plancka (cPNP) [51, 52, 78, 79, 81]. W powyższym modelu jony są traktowane jako gaz elektronowy, a efekty jonowe są pominięte lub są uwzględniane częściowo, jak np. rozmiary jonów [44]. Woda jest dielektrykiem. W potencjale elektrochemicznym uwzględniono tylko tzw. składową idealną czyli potencjał elektryczny. A stąd układ równań (69) dobrze aproksymuje elektrodyfuzję np. w przypadku układu o odpowiednio niskich stężeniach jonów.

Zadajemy warunek początkowy

$$c_i(0, x) = c_{0i}(x), \quad x \in \Omega. \quad (70)$$

Dużym wyzwaniem teoretycznym i technicznym jest zadanie warunków brzegowych dla układu (69) mających zastosowanie w modelowaniu rzeczywistych procesów, które byłyby spójne z wynikami eksperymentalnymi. W znanych pracach Bilera, Hilhorst, Hebisch i Nadziei [5, 6, 7, 8, 9] dowodzi się istnienie, jednoznaczność i bada się asymptotykę rozwiązań, ale wyłącznie układów fizycznie zamkniętych, tzn. strumień ładunków jest na brzegu $\partial\Omega$ równy zero, opisujących chemotaksję. Ponadto autorzy ci zakładają dość mało fizycznie możliwy do realizacji jednorodny warunek Dirichleta na potencjał φ . Również w wielu najnowszych pracach matematycznych poświęconych kanałom jonowym lub zagadnieniom pokrewnym autorstwa m.in. Constantina, Eisenberga, Liu, Li i Wanga, wprowadza się pewne uogólnienia układu (69) uwzględniające niektóre efekty jonowe i wzajemne zderzenia jonów, ale nie dopuszcza się niejednorodnego strumienia na brzegu [18, 25, 26, 41, 44, 57, 60, 61, 62, 76, 85]. Moim zdaniem do opisu układów fizycznie otwartych, tzn. takich, że strumień ładunków przepływa przez brzeg lub jego

fragment, szczególnie przydatne są warunki brzegowe Changa-Jaffé (CJ) użyte po raz pierwszy przez tych właśnie autorów w 1952 roku do analizy polaryzacji w elektrolitach w przypadku jednowymiarowym, $n = 1$ [13]. Od tego czasu w wielu pracach z elektrochemii takie warunki były rozważane [10, 30, 56, 63, 80]. Podstawową ideą w zdefiniowaniu tych warunków jest założenie, że składowa normalna strumienia ładunków na brzegu $\partial\Omega$ jest proporcjonalna do różnicy ważonej między strumieniami wewnątrz i na zewnątrz obszaru Ω ,

$$J_i \cdot \mathbf{n} = -k_{i1}c_{i,out} + k_{i2}c_i, \quad (t, x) \in [0, T] \times \partial\Omega, \quad (71)$$

gdzie k_{i1} , k_{i2} to stałe materiałowe, które opisują przepuszczalność brzegowej warstwy granicznej, a $c_{i,out}$ są stężeniami składników na zewnątrz ośrodka - przyjmuje się, że są stałe. Warunki brzegowe (71) są typowe dla ewolucyjnego układu (69) i przechodzą w warunek Dirichleta na stężenia ładunków dla granicznego, tj. stacjonarnego układu cNPP. I znowu, znanych jest mi kilka artykułów matematycznych, w których dowodzi się twierdzenia dotyczące istnienia i własności rozwiązań, ale właśnie zagadnień stacjonarnych, a więc siłą rzeczy nie wykorzystujących warunków CJ [4, 26, 38, 43, 44, 55, 57, 60, 61, 76, 87]. Z mojego rozeznania wynika, że artykuł [A4] jest pierwszym, w którym bada się istnienie i analityczne własności rozwiązań jednowymiarowego ewolucyjnego układu cNPP, $n = 1$, z nieliniowymi warunkami brzegowymi, które w szczególności mogą mieć postać CJ. Zastosowaną tutaj technikę badawczą uogólniłem na przypadek trójwymiarowy, $n = 3$, w artykule [A9], gdzie zaproponowałem model kanału jonowego. W pracy tej wyidealizowany matematycznie zbiór Ω jest cylindrem, na którego poboczniczy strumień ma wartość zero, zaś na wlocie i wylocie zadane są warunki CJ. Na potencjał zadany jest warunek Robina. Warunki CJ są trudniejsze do badań matematycznych dotyczących istnienia rozwiązań lokalnych w czasie, głównie z powodu problemów ze znalezieniem odpowiednich oszacowań, jak i rozwiązań globalnych w czasie z powodu braku prawa zachowania masy lub ładunku. Trudności z lokalnymi dowodami zostały pokonane w [A4], [A9] poprzez rozważenie pewnych zbiorów domkniętych, ograniczonych i wypukłych zamiast kul domkniętych, w odpowiednich normach Sobolewa.

[A4] W artykule tym udowodniliśmy twierdzenia 4.2, 5.1, 6.1 o istnieniu, jednoznaczności i nieujemności lokalnych w czasie słabych rozwiązań w odpowiednich przestrzeniach Sobolewa, jednowymiarowego nieliniowego układu paraboliczno-eliptycznego (69) z warunkiem początkowym (70) oraz nieliniowymi warunkami brzegowymi na stężenia i niejednorodnym warunkiem Dirichleta na potencjał. Warunki brzegowe mogą mieć w szczególności postać CJ (71) na podstawie uwagi 3.2. Dla prostoty rozważyliśmy dwa rodzaje jonów, $s = 2$, ale wyniki można w sposób naturalny uogólnić na dowolną liczbę składników.

Oznaczmy $\Omega = (0, 1) \subset \mathbb{R}$ i niech $T > 0$ będzie dowolne. Niech funkcje $u_0, v_0 : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$, $f_i, g_i : [0, T] \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, $h_i : [0, T] \rightarrow \mathbb{R}$ i stałe $\alpha_i, \beta_i, \lambda > 0$ dla $i = 1, 2$ będą dane. Rozważamy problem różniczkowy

$$\begin{cases} u_t = \alpha_1 u_{xx} - \alpha_2 (u\varphi_x)_x, & (t, x) \in [0, T] \times \Omega, \\ v_t = \beta_1 v_{xx} + \beta_2 (v\varphi_x)_x, & (t, x) \in [0, T] \times \Omega, \\ \varphi_{xx} = \lambda(u - v), & (t, x) \in [0, T] \times \Omega, \end{cases} \quad (72)$$

$$u(0, x) = u_0(x), \quad v(0, x) = v_0(x), \quad x \in \Omega, \quad (73)$$

$$\begin{cases} \alpha_1 u_x(t, 0) - \alpha_2 u(t, 0)\varphi_x(t, 0) = f_1(t, u(t, 0)), & t \in [0, T], \\ \alpha_1 u_x(t, 1) - \alpha_2 u(t, 1)\varphi_x(t, 1) = f_2(t, u(t, 1)), & t \in [0, T], \\ \beta_1 v_x(t, 0) + \beta_2 v(t, 0)\varphi_x(t, 0) = g_1(t, v(t, 0)), & t \in [0, T], \\ \beta_1 v_x(t, 1) + \beta_2 v(t, 1)\varphi_x(t, 1) = g_2(t, v(t, 1)), & t \in [0, T], \\ \varphi(t, 0) = h_1(t), & t \in [0, T], \\ \varphi(t, 1) = h_2(t), & t \in [0, T]. \end{cases} \quad (74)$$

Jeśli położymy $s = 2$, $z_1 = -z$, $z_2 = z$, ($z \in \mathbb{N}$), $u = c_1$, $v = c_2$, $\alpha_1 = D_1$, $\alpha_2 = -D_1 z_1 \frac{F}{RT}$, $\beta_1 = D_2$, $\beta_2 = D_2 z_2 \frac{F}{RT}$, $\lambda = \frac{F}{\varepsilon_r \varepsilon_0}$, to układ (72) odpowiada układowi (69). Zgodnie z uwagą 2.1 przyjmijmy, że $h_1(t) = h_2(t) \equiv 0$. Definiujemy przestrzeń Sobolewa $V = H^1(\Omega)$ i $H = L^2(\Omega)$. Oczywiście tworzą one trójkę ewolucyjną $V \subset H \subset V^*$ z zanurzeniami gęstymi, ciągłymi i zwartymi. Rozważmy jeszcze zbiór

$$H_+ = \{u \in H : u(x) \geq 0 \text{ p.w. w } \Omega\}.$$

Założenie H

$$(H_0) \quad u_0 \in H \text{ i } v_0 \in H.$$

$$(H_1) \quad f_i, g_i, i = 1, 2 \text{ spełniają warunki Carathéodory'ego: } f_i(\cdot, u) \text{ i } g_i(\cdot, u) \text{ są mierzalne w sensie Lebesgue'a oraz } f_i(t, \cdot) \text{ i } g_i(t, \cdot) \text{ są ciągłe.}$$

$$(H_2) \quad \text{Spełnione są warunki wzrostu:}$$

$$|f_i(t, u)| \leq a_{1i} + a_{2i}|u|, \quad |g_i(t, u)| \leq b_{1i} + b_{2i}|u|,$$

dla p.w. $t \in (0, T)$ i dla każdego $u \in \mathbb{R}$, ze stałymi $a_{1i}, a_{2i}, b_{1i}, b_{2i} \geq 0$, $i = 1, 2$.

$$(H_3) \quad \text{Spełnione są jednostronne warunki Lipschitza:}$$

$$\begin{aligned} f_1(t, u_1) - f_1(t, u_2) &\geq -L_{f_1}(u_1 - u_2), \\ g_1(t, u_1) - g_1(t, u_2) &\geq -L_{g_1}(u_1 - u_2), \\ f_2(t, u_1) - f_2(t, u_2) &\leq L_{f_2}(u_1 - u_2), \\ g_2(t, u_1) - g_2(t, u_2) &\leq L_{g_2}(u_1 - u_2), \end{aligned}$$

dla p.w. $t \in (0, T)$ i dla każdego $u_1, u_2 \in \mathbb{R}$, $u_1 \geq u_2$, ze stałymi $L_{f_i}, L_{g_i} \geq 0$, $i = 1, 2$.

Założenie H^+

$$(H_0^+) \quad u_0 \in H_+ \text{ i } v_0 \in H_+.$$

$$(H_1^+) \quad \text{Dla każdego } u < 0 \text{ i dla p.w. } t \in (0, T)$$

$$f_1(t, u) \leq 0, \quad g_1(t, u) \leq 0,$$

$$f_2(t, u) \geq 0, \quad g_2(t, u) \geq 0.$$

Rozważmy następującą słabą postać problemu początkowo-brzegowego (72)–(74).

Problem PE. Znaleźć $u, v \in L^2(0, T; V)$ i $\varphi \in L^2(0, T; H^3(\Omega) \cap H_0^1(\Omega))$ takie, że $u_t, v_t \in L^2(0, T; V^*)$ i dla p.w. $t \in (0, T)$

$$\langle u_t, \eta \rangle_{V^* \times V} + \int_{\Omega} (\alpha_1 u_x - \alpha_2 u \varphi_x) \eta_x dx \quad (75)$$

$$= f_2(t, u(t, 1))\eta(1) - f_1(t, u(t, 0))\eta(0) \quad \text{dla każdego } \eta \in V,$$

$$\langle v_t, \zeta \rangle_{V^* \times V} + \int_{\Omega} (\beta_1 v_x + \beta_2 v \varphi_x) \zeta_x dx \quad (76)$$

$$= g_2(t, v(t, 1))\zeta(1) - g_1(t, v(t, 0))\zeta(0) \quad \text{dla każdego } \zeta \in V,$$

$$\int_{\Omega} \varphi_x \xi_x dx + \lambda \int_{\Omega} (u - v) \xi dx = 0 \quad \text{dla każdego } \xi \in H_0^1(\Omega), \quad (77)$$

i spełniony jest warunek początkowy (73).

Udowodniliśmy następujące twierdzenia.

Twierdzenie 9 ([A4], tw. 4.2). *Jeśli spełnione są założenia (H_0) , (H_1) , (H_2) , to istnieje $T > 0$ takie, że Problem PE ma rozwiązanie.*

Twierdzenie 10 ([A4], tw. 5.1.) *Jeśli spełnione jest Założenie H, to Problem PE ma co najwyżej jedno rozwiązanie na przedziale $[0, T]$ dla dowolnego $T > 0$.*

Twierdzenie 11 ([A4], tw. 6.1). *Założmy, że zachodzą Założenia H, H^+ . Wtedy jeśli rozwiązanie Problemu PE istnieje na przedziale $[0, T]$ dla pewnego $T > 0$, to dla każdego $t \in [0, T]$ mamy $u(t) \in H_+$ i $v(t) \in H_+$.*

Aby dowieść twierdzenie 9, rozdzielamy Problem PE na dwa pomocnicze problemy, a mianowicie na problem eliptyczny i paraboliczny. Taką technikę zapoczątkował Gajewski [33], a później stosowali ją m.in. Biler, Hebisch i Nadzieja [5, 6]. W lematach 4.1 i 4.2 wykazujemy, że problemy te mają jedyne rozwiązanie, co pozwala zdefiniować pewien operator Λ_T określony na zbiorze $B = B(T, Q_0, Q_1, Q_2, R_0, R_1, R_2)$ sparametryzowanym przez czas $T > 0$ i stałe $Q_0, Q_1, Q_2, R_0, R_1, R_2 > 0$,

$$B = \left\{ (w, z) \in X_T : \|w\|_{L^2(0,T;H)}^2 \leq Q_0, \|w_x\|_{L^2(0,T;H)}^2 \leq Q_1, \right. \\ \left. \|z\|_{L^2(0,T;H)}^2 \leq R_0, \|z_x\|_{L^2(0,T;H)}^2 \leq R_1, \right. \\ \left. \|w_t\|_{L^2(0,T;V^*)}^2 \leq Q_2, \|z_t\|_{L^2(0,T;V^*)}^2 \leq R_2 \right\}, \quad (78)$$

gdzie

$$X_T = \{(u, v) \in L^2(0, T; V) \times L^2(0, T; V) : u_t, v_t \in L^2(0, T; V^*)\} \quad (79)$$

z normą

$$\|(u, v)\|_{X_T} = \|u\|_{L^2(0,T;V)} + \|v\|_{L^2(0,T;V)} + \|u_t\|_{L^2(0,T;V^*)} + \|v_t\|_{L^2(0,T;V^*)},$$

$$\|u\|_{L^2(0,T;V)}^2 = \int_0^T \|u(t)\|_V^2 dt, \quad \|u_t\|_{L^2(0,T;V^*)}^2 = \int_0^T \|u_t(t)\|_{V^*}^2 dt$$

jest przestrzenią Sobolewa. Zuważamy, że zbiór B jest domknięty, ograniczony, wypukły i niepusty. Następnie korzystamy z lematów 4.3, 4.4 i z poniższej wersji twierdzenia Schaudera–Tychonoffa o punkcie stałym, które jest konsekwencją twierdzenia 1 w [3].

Twierdzenie 12 ([A4], tw. 4.1). *Niech X będzie refleksywną przestrzenią Banacha i niech $C \subset X$ będzie domkniętym, ograniczonym, wypukłym i niepustym zbiorem. Jeśli funkcja $\Lambda : C \rightarrow C$ jest ciągowo słabo ciągła, to ma co najmniej jeden punkt stały.*

Warto podkreślić, że B nie jest kulą domkniętą, jak np. w [5, 6], ale jest podzbiorem domkniętej kuli domkniętej. To właśnie taka postać zbioru B pozwoliła na dobór parametrów i zagwarantowała istnienie $T > 0$ takich, żeby operator Λ_T był wewnętrznym, tzn. $\Lambda_T(B) \subset B$. Tego typu trudności w znalezieniu odpowiednich oszacowań są spowodowane niejednorodnym i nieliniowym charakterem warunków brzegowych (74). Ciekawe jest też skorzystanie pomocniczo z ułamkowych przestrzeni Sobolewa $H^s(\Omega)$, $s \in (\frac{1}{2}, 1)$. Pozwoliło to uniezależnić dowód istnienia rozwiązania od wielkości stałych występujących w równaniach, a w szczególności od współczynników dyfuzji D_i , co jest istotne w zastosowaniach fizycznych. Twierdzenie 10 wykazaliśmy w oparciu o nierówności Gronwalla, Höldera, Younga i lemat Ehrlinga. Aby dowieść twierdzenie 11, znowu skorzystaliśmy z twierdzenia 12 z użyciem metody bariery.

[A9] W artykule tym badałem model transportu i dyfuzji jonów w kanałach biologicznych. Jest on opisany trójwymiarowym nieliniowym układem paraboliczno-eliptycznym (69) z warunkiem początkowym (70) oraz nieliniowymi warunkami brzegowymi na stężenia i warunkiem Robina na potencjał. Istotną nowością jest rozważenie warunków brzegowych Changa–Jaffé na strumienie, na wlocie i wylocie kanału (71), oraz Robina na potencjał, jak również dopuszczenie dowolnej liczby różnych rodzajów jonów o różnych ładunkach i ruchliwościach. Udowodniłem twierdzenia 4.2, 5.1, 6.1 o istnieniu, jednoznaczności i nieujemności lokalnych w czasie słabych rozwiązań w odpowiednich przestrzeniach Sobolewa oraz lematy 4.1, 4.2, 4.3, 4.4. Zastosowałem podobną technikę dowodową jak w [A4], ale ze względu na wymiar, $n = 3$, skonstruowałem inny, bardziej subtelny zbiór B , inne nierówności różniczkowo-całkowe oraz związane ze śladem, a ponadto przestrzeń Sobolewa $L^2(0, T, H^1(\Omega))$ musiałem zaaproxymować jej gęstą podprzestrzenią $L^2(0, T, H^2(\Omega))$. Udowodniłem również dwa pomocnicze twierdzenia 3.1, 3.2 o oszacowaniu i regularyzacji rozwiązań równania eliptycznego z warunkiem brzegowym Robina.

Definiujemy uproszczony cylindryczny kanał membranowy $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ z brzegiem $\partial\Omega$ należącym do klasy C^∞ postaci

$$\Omega = \left\{ (x_1, x_2, x_3) \in \mathbb{R}^3 : 0 < x_1 < 1, x_2^2 + x_3^2 < g^2(x_1) \right\},$$

gdzie $g \in C^\infty([0, 1], \mathbb{R})$. Brzeg $\partial\Omega$ dzielimy na trzy części:

$$\partial_1\Omega = \left\{ (x_1, x_2, x_3) \in \partial\Omega : x_1 = 0 \right\},$$

$$\partial_2\Omega = \left\{ (x_1, x_2, x_3) \in \partial\Omega : x_1 = 1 \right\},$$

$$\partial_3\Omega = \left\{ (x_1, x_2, x_3) \in \partial\Omega : 0 < x_1 < 1, x_2^2 + x_3^2 = g^2(x_1) \right\}.$$

Części $\partial_1\Omega$, $\partial_2\Omega$ postrzegamy jako wlot i wylot kanału, odpowiednio, zaś $\partial_3\Omega$ - ścianę kanału. Niech funkcje $c_{0i} : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$, $a, b, h : [0, T] \times \partial\Omega \rightarrow \mathbb{R}$ oraz stałe $D_i, \alpha, \lambda > 0$, $a_{ji}, b_{ji} \geq 0$, $z_i \in \mathbb{R}$, $i = 1, \dots, s$, $j = 1, 2$ będą dane, gdzie $T > 0$ jest dowolne. Rozważamy problem różniczkowy

$$\begin{cases} \partial_t c_i + \operatorname{div}(-D_i(\nabla c_i + \alpha z_i c_i \nabla \varphi)) = 0, & (t, x) \in [0, T] \times \Omega, \\ -\Delta \varphi = \lambda \sum_{j=1}^s z_j c_j, & (t, x) \in [0, T] \times \Omega, \end{cases} \quad (80)$$

$$c_i(0, x) = c_{0i}(x), \quad x \in \Omega, \quad (81)$$

$$\begin{cases} -D_i \left(\frac{\partial c_i}{\partial n} + \alpha z_i c_i \frac{\partial \varphi}{\partial n} \right) = -a_{1i} + b_{1i} c_i, & (t, x) \in [0, T] \times \partial_1\Omega, \\ -D_i \left(\frac{\partial c_i}{\partial n} + \alpha z_i c_i \frac{\partial \varphi}{\partial n} \right) = -a_{2i} + b_{2i} c_i, & (t, x) \in [0, T] \times \partial_2\Omega, \\ -D_i \left(\frac{\partial c_i}{\partial n} + \alpha z_i c_i \frac{\partial \varphi}{\partial n} \right) = 0, & (t, x) \in [0, T] \times \partial_3\Omega, \\ a(t, x) \frac{\partial \varphi}{\partial n} + b(t, x) \varphi = h(t, x), & (t, x) \in [0, T] \times \partial\Omega, \end{cases} \quad (82)$$

dla $i = 1, \dots, s$. Definiujemy przestrzeń Sobolewa $V = H^1(\Omega)$ i $H = L^2(\Omega)$. Tworzą one trójkę ewolucyjną $V \subset H \subset V^*$ z zanurzeniami gęstymi, ciągłymi i zwartymi. Rozważmy jeszcze zbiór

$$H_+ = \{u \in H : u(x) \geq 0 \text{ p.w. w } \Omega\}.$$

Założenie H

$$(H_0) \quad c_{0i} \in H, \quad i = 1, \dots, s.$$

$$(H_1) \quad \frac{b}{a} \in L^\infty(0, T; C^\infty(\partial\Omega)), \quad \frac{h}{a} \in L^\infty(0, T; H^{\frac{1}{2}}(\partial\Omega)).$$

$$(H_2) \quad \frac{b}{a}(t, x) \geq p_0 > 0 \text{ dla p.w. } t \in (0, T) \text{ i każdego } x \in \partial\Omega, \quad p_0 = \text{const.}$$

Rozważmy następującą słabą postać problemu początkowo-brzegowego (80)–(82).

Problem PE. Znaleźć $c_i \in L^2(0, T; V)$ i $\varphi \in L^2(0, T; H^2(\Omega))$ takie, że $\partial_t c_i \in L^2(0, T; V^*)$ i dla p.w. $t \in (0, T)$

$$\langle \partial_t c_i, \eta_i \rangle_{V^* \times V} + \int_{\Omega} D_i(\nabla c_i + \alpha z_i c_i \nabla \varphi) \circ \nabla \eta_i dx \quad (83)$$

$$\begin{aligned} &= \int_{\partial_1 \Omega} (a_{1i} - b_{1i} c_i) \eta_i d\sigma + \int_{\partial_2 \Omega} (a_{2i} - b_{2i} c_i) \eta_i d\sigma \quad \text{dla każdego } \eta_i \in V, \\ &\int_{\Omega} \nabla \varphi \circ \nabla \xi dx + \int_{\partial \Omega} \frac{b}{a} \varphi \xi d\sigma = \lambda \sum_{j=1}^s \int_{\Omega} z_j c_j \xi dx + \int_{\partial \Omega} \frac{h}{a} \xi d\sigma \quad \text{dla każdego } \xi \in V, \end{aligned} \quad (84)$$

i spełniony jest warunek początkowy (81).

Udowodniliśmy następujące twierdzenia.

Twierdzenie 13 ([A9], tw. 4.2). *Jeśli spełnione jest Założenie H, to istnieje $T > 0$ takie, że Problem PE ma rozwiązanie.*

Twierdzenie 14 ([A9], tw. 5.1). *Jeśli spełnione jest Założenie H, to Problem PE ma co najwyżej jedno rozwiązanie na przedziale $[0, T]$ dla dowolnego $T > 0$.*

Twierdzenie 15 ([A9], tw. 6.1). *Założmy, że zachodzi Założenie H oraz $c_{0i} \in H_+$, $i = 1, \dots, s$. Wtedy jeśli rozwiązanie Problemu PE istnieje na przedziale $[0, T]$ dla pewnego $T > 0$, to dla każdego $t \in [0, T]$ mamy $c_i(t) \in H_+$, $i = 1, \dots, s$.*

Idea dowodów powyższych twierdzeń jest podobna jak w [A4], przy czym zbiór $B = B(T, Q_0, Q_1, Q_2, Q_3)$ ma teraz postać

$$B = \left\{ w \in X_T : \|w_i\|_{L^2(0, T; H)}^2 \leq Q_0, \|\nabla w_i\|_{L^2(0, T; H)}^2 \leq Q_1, \|\partial_t w_i\|_{L^2(0, T; V^*)}^2 \leq Q_2, \right. \\ \left. \|w_i\|_{L^4(0, T; H)}^4 \leq Q_3 \right\}. \quad (85)$$

Różnica w stosunku do (78) polega na dodaniu warunku: $\|w_i\|_{L^4(0, T; H)}^4 \leq Q_3$. Dalszy komentarz jest analogiczny, jak ten po sformułowaniu twierdzenia 12.

4 Dyfuzja i transport impulsów w komórkach nerwowych, [A2], [A3]

Zjawisko generacji i propagacji impulsów nerwowych w neuronach zaczęto intensywnie badać w drugiej połowie XX wieku. Neuron, czyli komórka nerwowa, jest podstawowym elementem układu nerwowego. Jednym z najbardziej znanych modeli jest jednowymiarowy reakcyjno-dyfuzyjno-kinetyczny układ Hodgkina-Huxley'a [39] z 1952 roku

$$\begin{cases} u_t - u_{xx} = f(u, v), \\ v_t = g(u, v), \end{cases} \quad (86)$$

gdzie funkcje f i g mają odpowiednią postać i są zadane. Funkcja $u \in \mathbb{R}$ jest potencjałem pola elektrycznego w neuronie, zaś funkcja $v \in \mathbb{R}^3$ opisuje przewodnictwo trzech rodzajów jonów. Model ten jest matematycznie skomplikowany i został uproszczony przez Nagumo [70] i FitzHugha [31], [32] do postaci

$$\begin{cases} u_t - u_{xx} = -f(u) - v, \\ v_t = bu, \end{cases} \quad (87)$$

gdzie $f(u) = u(a - u)(1 - u)$, $a, b > 0$ są stałe i $v \in \mathbb{R}$. Głównie ze względu na trudności w konstrukcji rozwiązań szczególnej postaci np. typu solitonowej fali biegnącej, spowodowanych nieliniowością funkcji f , McKean [68] zmodyfikował ten układ następująco

$$\begin{cases} u_t - u_{xx} = H(u - a) - u - v, \\ v_t = bu - dv, \end{cases} \quad (88)$$

gdzie H jest funkcją Heaviside'a oraz $a, b > 0$, $d \geq 0$ są stałe. Bardziej ogólne układy tego typu, obejmujące zarówno neurobiologiczny model Hodgkina-Huxley'a jak i model Fielda-Noyesa reakcji chemicznej Bieleusowa-Żabotyńskiego, z $v \in \mathbb{R}^n$ były badane w [27], [53]. Hiperboliczne uogólnienie układu (88) w formie

$$\begin{cases} \tau u_{tt} + u_t - u_{xx} = H(u - a) - u - v, \\ v_t = bu - dv, \end{cases} \quad (89)$$

gdzie $\tau \geq 0$ oznacza czas relaksacji, zostało zaproponowane w 2015 roku w pracy Likusa i Vladimirova [58]. Autorzy ci skonstruowali soliton i wykazali jego stabilność. Pierwsze równanie w (89) można formalnie wyprowadzić, zastępując strumień Ficka w równaniu ciągłości

$$\gamma u_t + \operatorname{div} J = 0 \quad (90)$$

strumieniem, który spełnia równanie Cattaneo

$$\tau J_t + J = -k \nabla u \quad (91)$$

uwzględniające efekty pamięci związanej z wewnętrzną strukturą ośrodka, i przyjmując matematyczne uproszczenie $k = \gamma = 1$ [45], [67]. Tutaj u określa propagującą falę jonową. W [34, 35] rozpatruje się model jeszcze bardziej ogólny od tego z [58]. W [35] przedstawiono wyniki symulacji numerycznych modelu z [34], z których wynika, że dynamika ewolucji rozwiązania solitonopodobnego w modelu z relaksacją jest odmienna od tego, co obserwuje się bez włączenia tego efektu.

[A2] W tym artykule udowodniłem twierdzenie 4.1 o istnieniu, jednoznaczności i oszacowaniu lokalnych w czasie, ograniczonych wraz z pierwszymi pochodnymi, z lokalnie hölderowskimi lub globalnie lipschitzowskimi pierwszymi pochodnymi, stosownie do regularności warunków początkowych, rozwiązań pewnego jednowymiarowego słabo sprzężonego nieliniowego hiperbolicznego problemu początkowego. Wykazałem również lemat 3.1 o równoważności tego zagadnienia różniczkowego z układem całkowym, w odpowiedniej klasie funkcji. Nie znalazłem w literaturze żadnych wyników dotyczących istnienia rozwiązań takiego problemu początkowego.

Niech funkcje $f : [0, T] \times \mathbb{R}^{2+k} \rightarrow \mathbb{R}$, $g = (g_1, \dots, g_k) : [0, T] \times \mathbb{R}^{2+k} \rightarrow \mathbb{R}^k$ zmiennych $(t, x, p, r) \in [0, T] \times \mathbb{R}^{2+k}$, $u_0, u_1 : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, $v_0 = (v_{01}, \dots, v_{0k}) : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^k$ i stała $c \in \mathbb{R}$ będą dane, gdzie $T > 0$ jest ustalone. Rozważamy zagadnienie początkowe

$$\begin{cases} u_{tt} - u_{xx} + cu_t = f(t, x, u, v), & (t, x) \in [0, T] \times \mathbb{R}, \\ v_t = g(t, x, u, v), & (t, x) \in [0, T] \times \mathbb{R}, \end{cases} \quad (92)$$

$$\begin{cases} u(0, x) = u_0(x), & x \in \mathbb{R}, \\ v(0, x) = v_0(x), & x \in \mathbb{R}, \\ u_t(0, x) = u_1(x), & x \in \mathbb{R}, \end{cases} \quad (93)$$

gdzie $v = (v_1, \dots, v_k)$. Jeśli $c > 0$, to pierwsze hiperboliczne równanie falowe w (92) nazywane jest równaniem telegrafistów. Pozostałe k równań w (92) traktuje się jako równania zwyczajne z parametrem x . Symbolem $\|\cdot\|$ oznaczamy normę maksimum w $\mathbb{R}^d$, $d \in \mathbb{N}$

$$\|y\| = \max_{i=1, \dots, d} |y_i|, \quad y = (y_1, \dots, y_d) \in \mathbb{R}^d. \quad (94)$$

W przestrzeni funkcji ciągłych i ograniczonych $C_b(\Omega, \mathbb{R}^d)$ definiujemy normę supremum

$$\|z\|_0 = \sup \{ \|z(\omega)\| : \omega \in \Omega \}, \quad z \in C_b(\Omega, \mathbb{R}^d), \quad (95)$$

gdzie $\Omega = \mathbb{R}$ lub $\Omega \subset \mathbb{R}^2$. Przestrzeń funkcji ciągłych i ograniczonych wraz z pierwszymi pochodnymi oznaczamy przez $C_b^1(\Omega, \mathbb{R}^d)$. Normę w tej przestrzeni definiujemy wzorem

$$\|z\|_1 = \|z\|_0 + \|z_t\|_0 + \|z_x\|_0, \quad z \in C_b^1(\Omega, \mathbb{R}^d). \quad (96)$$

Przestrzenie $(C_b(\Omega, \mathbb{R}^d), \|\cdot\|_0)$ i $(C_b^1(\Omega, \mathbb{R}^d), \|\cdot\|_1)$ są przestrzeniami Banacha. Niech $\alpha \in (0, 1]$ będzie ustalona. Dla dowolnej funkcji $z \in C_b(\Omega, \mathbb{R}^d)$ określamy liczbę

$$[z]_{H,\alpha} = \sup \{ \|z(t, x) - z(\bar{t}, \bar{x})\| [|t - \bar{t}| + |x - \bar{x}|]^{-\alpha} : (t, x), (\bar{t}, \bar{x}) \in \Omega \}. \quad (97)$$

Jeśli $[z]_{H,\alpha} < \infty$, to jest to najmniejsza stała Höldera dla funkcji z i wykładnika α , i jest ona nazywana współczynnikiem Höldera. Jeśli $\alpha = 1$, to jest to współczynnik Lipschitza. Wprowadzamy przestrzeń Höldera $C^{0+\alpha}(\Omega, \mathbb{R}^d) \subset C_b(\Omega, \mathbb{R}^d)$, $C^{1+\alpha}(\Omega, \mathbb{R}^d) \subset C_b^1(\Omega, \mathbb{R}^d)$ ze skończonymi normami, odpowiednio

$$\begin{aligned} \|z\|_{0+\alpha} &= \|z\|_0 + [z]_{H,\alpha}, \\ \|z\|_{1+\alpha} &= \|z\|_1 + [z_t]_{H,\alpha} + [z_x]_{H,\alpha}. \end{aligned} \quad (98)$$

Oczywiście jeśli $\Omega = \mathbb{R}$, to t and z_t w powyższych definicjach nie występuje. Niech $\Delta(x, \tau) \subset \mathbb{R} \times [0, \tau]$, $x \in \mathbb{R}$ będzie trójkątem równoramiennym o wierzchołkach $(x - \tau, 0)$, (x, τ) , $(x + \tau, 0)$. Definiujemy przestrzeń Höldera $C_{loc}^{1+\alpha}([0, \tau] \times \mathbb{R}, \mathbb{R}^d) \subset C_b^1([0, \tau] \times \mathbb{R}, \mathbb{R}^d)$ funkcji $z \in C^{1+\alpha}(\Delta(x, \tau), \mathbb{R}^d)$ dla dowolnego $\Delta(x, \tau)$, ze stałymi

$$\begin{aligned} [z_t]_{H,\alpha,\Delta(x,\tau)} &= \sup \{ \|z_t(t, x) - z_t(\bar{t}, \bar{x})\| [|t - \bar{t}| + |x - \bar{x}|]^{-\alpha} : (t, x), (\bar{t}, \bar{x}) \in \Delta(x, \tau) \}, \\ [z_x]_{H,\alpha,\Delta(x,\tau)} &= \sup \{ \|z_x(t, x) - z_x(\bar{t}, \bar{x})\| [|t - \bar{t}| + |x - \bar{x}|]^{-\alpha} : (t, x), (\bar{t}, \bar{x}) \in \Delta(x, \tau) \}, \end{aligned} \quad (99)$$

niezależnymi od $\Delta(x, \tau)$. Mówimy, że z_t, z_x są jednostajnie hölderowsko ciągłe w $[0, \tau] \times \mathbb{R}$. Oczywiście jeśli $\alpha = 1$, to $C_{loc}^{1+\alpha}([0, \tau] \times \mathbb{R}, \mathbb{R}^d) = C^{1+\alpha}([0, \tau] \times \mathbb{R}, \mathbb{R}^d)$.

Założenie H₁[u_0, v_0, u_1]. Funkcje $u_0 \in C^{1+\alpha}(\mathbb{R}, \mathbb{R}) \cap C^2(\mathbb{R}, \mathbb{R})$, $v_0 \in C^{1+\alpha}(\mathbb{R}, \mathbb{R}^k)$, $u_1 \in C^{0+\alpha}(\mathbb{R}, \mathbb{R}) \cap C^1(\mathbb{R}, \mathbb{R})$ są takie, że:

$$\begin{aligned} \|u_0\|_0 &\leq \Lambda_1, \quad \|u_1\|_0 \leq \Lambda_1^{(1)}, \quad \|(u_0)_x\|_0 \leq \Lambda_1^{(1)}, \\ [u_1]_{H,\alpha} &\leq \Lambda_1^{(2)}, \quad [(u_0)_x]_{H,\alpha} \leq \Lambda_1^{(2)}, \\ \|v_0\|_0 &\leq \Lambda_2, \quad \|g(0, \cdot, u_0(\cdot), v_0(\cdot))\|_0 \leq \Lambda_2^{(1)}, \quad \|(v_0)_x\|_0 \leq \Lambda_2^{(1)}, \\ [g(0, \cdot, u_0(\cdot), v_0(\cdot))]_{H,\alpha} &\leq \Lambda_2^{(2)}, \quad [(v_0)_x]_{H,\alpha} \leq \Lambda_2^{(2)}, \end{aligned}$$

gdzie stałe $\Lambda_i, \Lambda_i^{(j)} \geq 0$, $i, j = 1, 2$ są dowolnie zadane.

Założenie H₂[f, g]. Funkcje f, g oraz pochodne $f_x, f_p, f_{r_i}, g_x, g_p, g_{r_i}$, $i = 1, \dots, k$ są ciągłe.

Ponadto istnieją niemalejące funkcje $M_i, M_i^{(1)}, H_2, H_2^{(1)} : \mathbb{R}_+^2 \rightarrow \mathbb{R}_+, i = 1, 2$ takie, że dla każdego $t, \bar{t} \in [0, T], x, \bar{x} \in \mathbb{R}, (q_1, q_2) \in \mathbb{R}_+^2, |p|, |\bar{p}| \leq q_1, \|r\|, \|\bar{r}\| \leq q_2$:

$$\begin{aligned} |f(t, x, p, r)| &\leq M_1(q_1, q_2), \\ |f_x(t, x, p, r)|, |f_p(t, x, p, r)|, |f_{r_i}(t, x, p, r)| &\leq M_1^{(1)}(q_1, q_2), \\ \|g(t, x, p, r)\| &\leq M_2(q_1, q_2), \\ \|g_x(t, x, p, r)\|, \|g_p(t, x, p, r)\|, \|g_{r_i}(t, x, p, r)\| &\leq M_2^{(1)}(q_1, q_2), \\ \|g(t, x, p, r) - g(\bar{t}, x, p, r)\| &\leq H_2(q_1, q_2) |t - \bar{t}|^\alpha, \\ \|g_x(t, x, p, r) - g_x(t, \bar{x}, \bar{p}, \bar{r})\| &\leq H_2^{(1)}(q_1, q_2) [|x - \bar{x}| + |p - \bar{p}| + \|r - \bar{r}\|]^\alpha, \\ \|g_p(t, x, p, r) - g_p(t, \bar{x}, \bar{p}, \bar{r})\| &\leq H_2^{(1)}(q_1, q_2) [|x - \bar{x}| + |p - \bar{p}| + \|r - \bar{r}\|]^\alpha, \\ \|g_{r_i}(t, x, p, r) - g_{r_i}(t, \bar{x}, \bar{p}, \bar{r})\| &\leq H_2^{(1)}(q_1, q_2) [|x - \bar{x}| + |p - \bar{p}| + \|r - \bar{r}\|]^\alpha. \end{aligned}$$

Założenie $H_3[Q]$. Parametry $Q_i, Q_i^{(j)}, i, j = 1, 2$ spełniają nierówności:

$$\begin{aligned} Q_1 &> \Lambda_1, \\ Q_1^{(1)} &> \Lambda_1^{(1)}, \\ Q_1^{(2)} &> 2\Lambda_1^{(2)}, & \alpha \in (0, 1), \\ Q_1^{(2)} &> M_1^* + \frac{c^2}{4}Q_1 + \frac{c^2}{4}\Lambda_1 + \frac{3}{2}c\Lambda_1^{(1)} + 2\Lambda_1^{(2)}, & \alpha = 1, \\ Q_2 &> \Lambda_2, \\ Q_2^{(1)} &\geq M_2^*, \quad Q_2^{(1)} > \Lambda_2^{(1)}, \\ Q_2^{(2)} &> H_2^*, \quad Q_2^{(2)} > \Lambda_2^{(2)}, & \alpha \in (0, 1), \\ Q_2^{(2)} &\geq M_2^{(1)*} [1 + 2(Q_1^{(1)} + nQ_2^{(1)})] + H_2^*, & \alpha = 1, \\ Q_2^{(2)} &> M_2^{(1)*} (1 + Q_1^{(1)} + nQ_2^{(1)}) + \Lambda_2^{(2)}, & \alpha = 1, \end{aligned}$$

gdzie $M_i^* = M_i(Q_1, Q_2), M_i^{(1)*} = M_i^{(1)}(Q_1, Q_2), H_2^* = H_2(Q_1, Q_2), H_2^{(1)*} = H_2^{(1)}(Q_1, Q_2), i = 1, 2$.

Definiujemy zbiór $C_{b,\tau}^{1,\alpha}(Q)$ sparametryzowany przez czas $\tau \in (0, T]$ i stałe $Q_i, Q_i^{(j)} > 0, i, j = 1, 2$,

$$\begin{aligned} C_{b,\tau}^{1,\alpha}(Q) &= \left\{ (u, v) \in C_{loc}^{1+\alpha}([0, \tau] \times \mathbb{R}, \mathbb{R}^{1+k}) : \right. \\ &\quad u(0, x) = u_0(x), \quad v(0, x) = v_0(x), \quad u_t(0, x) = u_1(x), \\ &\quad \|u\|_0 \leq Q_1, \quad \|u_t\|_0 \leq Q_1^{(1)}, \quad \|u_x\|_0 \leq Q_1^{(1)}, \quad [u_t]_{H,\alpha,\Delta(x,\tau)} \leq Q_1^{(2)}, \quad [u_x]_{H,\alpha,\Delta(x,\tau)} \leq Q_1^{(2)}, \\ &\quad \left. \|v\|_0 \leq Q_2, \quad \|v_t\|_0 \leq Q_2^{(1)}, \quad \|v_x\|_0 \leq Q_2^{(1)}, \quad [v_t]_{H,\alpha,\Delta(x,\tau)} \leq Q_2^{(2)}, \quad [v_x]_{H,\alpha,\Delta(x,\tau)} \leq Q_2^{(2)}, \quad x \in \mathbb{R} \right\}. \end{aligned} \tag{100}$$

Twierdzenie 16 ([A2], tw. 4.1). *Jeśli spełnione są Założenia $H_1[u_0, v_0, u_1], H_2[f, g], H_3[Q]$ i $c \geq 0$, to istnieje $\tau \in (0, T]$ takie, że problem (92), (93) ma jedyne rozwiązanie $(u, v) \in C_{b,\tau}^{1,\alpha}(Q)$ i $u \in C^2([0, \tau] \times \mathbb{R}, \mathbb{R})$.*

Twierdzenie 16 udowodniłem przy pomocy twierdzenia Banacha o punkcie stałym, wykorzystując lemat 3.1 o postaci całkowej i lemat Arzeli-Ascoliego. Podkreślmy, że w twierdzeniu 16 przyjmuje się założenie, że f, g mogą być tylko lokalnie lipschitzowskie względem $p \in \mathbb{R}$,

$r \in \mathbb{R}^k$, co pozwala uwzględnić w szczególności równania z członami wielomianowymi względem u i v . Ponadto mogą to być wszystkie wielomiany o ile prawe strony równań nie zależą od t, x . Twierdzenie 16 jest również prawdziwe, gdy układ zwyczajny w układzie (92) nie występuje i $f = f(t, x, p)$. Warto podkreślić, że $C_{b,\tau}^{1,\alpha}(Q)$ nie jest kulą domkniętą, ale jest domkniętym podzbiorem kuli domkniętej w przestrzeni $C_b([0, \tau] \times \mathbb{R}, \mathbb{R}^{1+k})$. To właśnie taka postać zbioru $C_{b,\tau}^{1,\alpha}(Q)$ pozwoliła na dobór parametrów i zagwarantowała istnienie $\tau > 0$ takich, żeby odpowiedni operator $H = (F, G)$ był wewnętrznym, tzn. $H(C_{b,\tau}^{1,\alpha}(Q)) \subset C_{b,\tau}^{1,\alpha}(Q)$ i zwiężającym.

[A3] W tej pracy udowodniłem twierdzenia 4.3 i 4.6 o istnieniu, jednoznaczności i oszacowaniu globalnych w czasie klasycznych rozwiązań jednowymiarowego słabo sprzężonego nieliniowego hiperbolicznego problemu początkowego (92), (93) badanego w [A2]. Ale teraz przedział $[0, T]$ w (92) zastępujemy półprostą $\mathbb{R}_0^+ = [0, \infty)$, zaś funkcje początkowe oznaczamy przez $\varphi_0, \psi_0, \varphi_1$ zamiast u_0, v_0, u_1 . Wykazałem też pomocnicze twierdzenie 2.2 o słabych hiperbolicznych nierównościach różniczkowych i lemat 3.1 o równoważności badanego problemu różniczkowego z pewnym układem całkowym, w trochę innej klasie funkcji niż w [A2]. Ponadto zaproponowałem metodę konstrukcji dolnych i górnych rozwiązań w przypadku ograniczonych f, g, u_0, u_1, v_0 . Polega ona na rozwiązaniu odpowiednio skojarzonych równań różniczkowych zwyczajnych z warunkiem początkowym. Taka metoda różniczkowa jest wygodniejsza do stosowania niż np. metoda całkowa z wykorzystaniem funkcji Greena opisana w [11] dla równań parabolicznych.

Twierdzenie 17 ([A3], tw. 4.3). *Założmy, że:*

- (1) $f \in C^1(\mathbb{R}_0^+ \times \mathbb{R}^{2+k}, \mathbb{R})$, $g \in C^1(\mathbb{R}_0^+ \times \mathbb{R}^{2+k}, \mathbb{R}^k)$,
- (2) f, g spełniają warunek Lipschitza względem p, r w $\mathbb{R}_0^+ \times \mathbb{R}^{2+k}$ ze stałą L ,
- (3) g_x, g_p, g_{r_i} , $i = 1, \dots, k$ spełniają warunek Lipschitza względem x, p, r w $\mathbb{R}_0^+ \times \mathbb{R}^{2+k}$ ze stałą L_1 ,
- (4) $\varphi_0 \in C^2(\mathbb{R}, \mathbb{R})$, $\varphi_1 \in C^1(\mathbb{R}, \mathbb{R})$, $\psi_0 \in C^1(\mathbb{R}, \mathbb{R}^k)$,
- (5) $(\psi_0)_x$ spełnia warunek Lipschitza w $\mathbb{R}$ ze stałą L_0 .

Wówczas istnieje jedyne rozwiązanie $(u, v) \in C^2(\mathbb{R}_0^+ \times \mathbb{R}, \mathbb{R}) \times C^1(\mathbb{R}_0^+ \times \mathbb{R}, \mathbb{R}^k)$ problemu (92), (93).

Funkcja $(u, v) \in C^2(\mathbb{R}_0^+ \times \mathbb{R}, \mathbb{R}) \times C^1(\mathbb{R}_0^+ \times \mathbb{R}, \mathbb{R}^k)$ spełniająca układ nierówności

$$\begin{cases} u_{tt} - u_{xx} + cu_t \leq f(t, x, u, v), & (t, x) \in \mathbb{R}_0^+ \times \mathbb{R}, \\ v_t \leq g(t, x, u, v), & (t, x) \in \mathbb{R}_0^+ \times \mathbb{R}, \\ \varphi_0(x) \geq u(0, x), & x \in \mathbb{R}, \\ \psi_0(x) \geq v(0, x), & x \in \mathbb{R}, \\ \varphi_1(x) \geq u_t(0, x), & x \in \mathbb{R}, \end{cases} \quad (101)$$

nazywana jest rozwiązaniem dolnym problemu (92), (93) w $\mathbb{R}_0^+ \times \mathbb{R}$. Gdy nierówności są przeciwnie, to nazywamy ją rozwiązaniem górnym tego problemu.

Założenie A. Istnieje co najmniej jedna para rozwiązań dolnych i górnych $(\underline{u}_0, \underline{v}_0)$, $(\bar{u}_0, \bar{v}_0)$ problemu (92), (93) taka, że

$$\underline{u}_0 \leq \bar{u}_0, \quad \underline{v}_0 \leq \bar{v}_0 \quad \text{w } \mathbb{R}_0^+ \times \mathbb{R}. \quad (102)$$

Dla danej pary rozwiązań dolnych i górnych $(\underline{u}_0, \underline{v}_0)$, $(\bar{u}_0, \bar{v}_0)$ problemu (92), (93) spełniających Założenie A definiujemy sektor

$$\langle (\underline{u}_0, \underline{v}_0), (\bar{u}_0, \bar{v}_0) \rangle = \left\{ (u, v) \in C^2(\mathbb{R}_0^+ \times \mathbb{R}, \mathbb{R}) \times C^1(\mathbb{R}_0^+ \times \mathbb{R}, \mathbb{R}^k) : \right.$$

$$\underline{u}_0(t, x) \leq u(t, x) \leq \bar{u}_0(t, x), \underline{v}_0(t, x) \leq v(t, x) \leq \bar{v}_0(t, x), (t, x) \in \mathbb{R}_0^+ \times \mathbb{R} \Big\}$$

oraz przedział

$$\langle m, M \rangle = \left\{ (u, v) \in \mathbb{R}^{1+k} : m_0 \leq u \leq M_0, m \leq v \leq M \right\},$$

gdzie $m = (m_1, \dots, m_k)$, $M = (M_1, \dots, M_k)$,

$$m_0 = \inf \left\{ \underline{u}_0(t, x) : (t, x) \in \mathbb{R}_0^+ \times \mathbb{R} \right\},$$

$$m_i = \inf \left\{ \underline{v}_{0i}(t, x) : (t, x) \in \mathbb{R}_0^+ \times \mathbb{R} \right\},$$

$$M_0 = \sup \left\{ \bar{u}_0(t, x) : (t, x) \in \mathbb{R}_0^+ \times \mathbb{R} \right\},$$

$$M_i = \sup \left\{ \bar{v}_{0i}(t, x) : (t, x) \in \mathbb{R}_0^+ \times \mathbb{R} \right\},$$

$\underline{v} = (\underline{v}_{01}, \dots, \underline{v}_{0k})$, $\bar{v} = (\bar{v}_{01}, \dots, \bar{v}_{0k})$, $i = 1, \dots, k$. Definiujemy jeszcze przy pomocy rekurencji dwa ciągi funkcji $(\underline{u}_n, \underline{v}_n)$, $(\bar{u}_n, \bar{v}_n)$, $\underline{u}_n, \bar{u}_n : \mathbb{R}_0^+ \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, $\underline{v}_n, \bar{v}_n : \mathbb{R}_0^+ \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^k$, $n \in \mathbb{N}_0 := \mathbb{N} \cup \{0\}$:

$$\begin{cases} \mathcal{L}\underline{u}_{n+1} = f(t, x, \underline{u}_n(t, x), \underline{v}_n(t, x)) + \frac{c^2}{4}\underline{u}_n(t, x), & (t, x) \in \mathbb{R}_0^+ \times \mathbb{R}, \\ (\underline{v}_{n+1})_t = g(t, x, \underline{u}_n(t, x), \underline{v}_n(t, x)), & (t, x) \in \mathbb{R}_0^+ \times \mathbb{R}, \\ \underline{u}_{n+1}(0, x) = \varphi_0(x), & x \in \mathbb{R}, \\ \underline{v}_{n+1}(0, x) = \psi_0(x), & x \in \mathbb{R}, \\ (\underline{u}_{n+1})_t(0, x) = \varphi_1(x), & x \in \mathbb{R}, \end{cases} \quad (103)$$

$$\begin{cases} \mathcal{L}\bar{u}_{n+1} = f(t, x, \bar{u}_n(t, x), \bar{v}_n(t, x)) + \frac{c^2}{4}\bar{u}_n(t, x), & (t, x) \in \mathbb{R}_0^+ \times \mathbb{R}, \\ (\bar{v}_{n+1})_t = g(t, x, \bar{u}_n(t, x), \bar{v}_n(t, x)), & (t, x) \in \mathbb{R}_0^+ \times \mathbb{R}, \\ \bar{u}_{n+1}(0, x) = \varphi_0(x), & x \in \mathbb{R}, \\ \bar{v}_{n+1}(0, x) = \psi_0(x), & x \in \mathbb{R}, \\ (\bar{u}_{n+1})_t(0, x) = \varphi_1(x), & x \in \mathbb{R}, \end{cases} \quad (104)$$

gdzie $\mathcal{L} = u_{tt} - u_{xx} + cu_t + \frac{c^2}{4}u$ jest operatorem działającym na funkcje $u \in C^2(\mathbb{R}_0^+ \times \mathbb{R}, \mathbb{R})$.

Twierdzenie 18 ([A3], tw. 4.6). *Założmy, że spełnione jest Założenie A oraz:*

- (1) $f \in C^1(\mathbb{R}_0^+ \times \mathbb{R} \times \langle m, M \rangle, \mathbb{R})$, $g \in C^1(\mathbb{R}_0^+ \times \mathbb{R} \times \langle m, M \rangle, \mathbb{R}^k)$,
- (2) f, g spełniają warunek Lipschitza względem p, r ze stałą L w $\mathbb{R}_0^+ \times \mathbb{R} \times \langle m, M \rangle$,
- (3) g_x, g_p, g_{r_i} , $i = 1, \dots, k$ spełniają warunek Lipschitza względem x, p, r ze stałą L_1 w $\mathbb{R}_0^+ \times \mathbb{R} \times \langle m, M \rangle$,
- (4) $f(t, x, p, r) + \frac{c^2}{4}p$, g są niemalejące względem p, r w $\mathbb{R}_0^+ \times \mathbb{R} \times \langle m, M \rangle$,
- (5) $c \geq 0$,
- (6) $\varphi_0 \in C^2(\mathbb{R}, \mathbb{R})$, $\varphi_1 \in C^1(\mathbb{R}, \mathbb{R})$, $\psi_0 \in C^1(\mathbb{R}, \mathbb{R}^k)$,
- (7) $(\psi_0)_x$ spełnia warunek Lipschitza ze stałą L_0 w $\mathbb{R}$.

Wówczas:

(i) istnieją jedyne rozwiązania $(\underline{u}_n, \underline{v}_n), (\bar{u}_n, \bar{v}_n) \in C^2(\mathbb{R}_0^+ \times \mathbb{R}, \mathbb{R}) \times C^1(\mathbb{R}_0^+ \times \mathbb{R}, \mathbb{R}^k)$, $n \in \mathbb{N}_0$ problemów (103), (104), odpowiednio,

(ii) spełnione są nierówności w $\mathbb{R}_0^+ \times \mathbb{R}$:

$$\underline{u}_0 \leq \underline{u}_1 \leq \underline{u}_2 \leq \dots \leq \bar{u}_2 \leq \bar{u}_1 \leq \bar{u}_0,$$

$$\underline{v}_0 \leq \underline{v}_1 \leq \underline{v}_2 \leq \dots \leq \bar{v}_2 \leq \bar{v}_1 \leq \bar{v}_0,$$

(iii) $(\underline{u}_n, \underline{v}_n), (\bar{u}_n, \bar{v}_n)$, $n \in \mathbb{N}_0$ są dolnym i górnym rozwiązaniem problemu (92), (93) w $\mathbb{R}_0^+ \times \mathbb{R}$,

(iv) $\lim_{n \rightarrow \infty} (\bar{u}_n(t, x) - \underline{u}_n(t, x)) = 0$, $\lim_{n \rightarrow \infty} (\bar{v}_n(t, x) - \underline{v}_n(t, x)) = 0$ prawie jednostajnie w $\mathbb{R}_0^+ \times \mathbb{R}$,

(v) funkcja

$$(u(t, x), v(t, x)) = \lim_{n \rightarrow \infty} (\underline{u}_n(t, x), \underline{v}_n(t, x)) = \lim_{n \rightarrow \infty} (\bar{u}_n(t, x), \bar{v}_n(t, x))$$

$\in C^2(\mathbb{R}_0^+ \times \mathbb{R}, \mathbb{R}) \times C^1(\mathbb{R}_0^+ \times \mathbb{R}, \mathbb{R}^k)$ jest jedynym rozwiązaniem problemu (92), (93) w sektorze $\langle (\underline{u}_0, \underline{v}_0), (\bar{u}_0, \bar{v}_0) \rangle$.

Twierdzenie 17 udowodniłem przy pomocy iteracyjnej metody Picarda, wykorzystując lemat 3.1 o postaci całkowej, lemat 4.1 o oszacowaniu, lemat 4.2 o przejściu granicznym oraz lemat Arzeli-Ascoliego. Z kolei twierdzenie 18 wykazałem przy pomocy metody monotonicznej dolnych i górnych rozwiązań, korzystając z lematów 3.1, 4.1, 4.2, lematu Arzeli-Ascoliego i twierdzenia 2.2 o słabych hiperbolicznych nierównościach różniczkowych. Podkreślmy, że w twierdzeniu 17 zakłada się globalny warunek Lipschitza na f, g, g_x, g_p, g_r względem p, r , zaś w twierdzeniu 18 tylko lokalny warunek Lipschitza, tj. dla p, r należących do przedziału $\langle m, M \rangle$. Dlatego też twierdzenie 18 dopuszcza równania z członami wielomianowymi względem u i v . Warto jeszcze zauważyć, że twierdzenia 17, 18 są również prawdziwe, gdy układ zwyczajny w układzie (92) nie występuje i $f = f(t, x, p)$.

5 Metody różnicowe dla lokalnych i nielokalnych modeli dyfuzji, [A1], [A5]

W rozdziałach 2, 3, 4 przedstawiłem wyniki dotyczące pewnych konkretnych układów równań różniczkowych. Ale jest wiele bardziej skomplikowanych zjawisk fizycznych do opisu których konstruuje się równania i układy równań różniczkowych z członami nielokalnymi. Takie równania nazywa się często równaniami różniczkowo-funkcyjnymi. Dla przykładu mogą to być równania reakcji-dyfuzji z przesuniętym argumentem czasowym lub przestrzennym oraz równania różniczkowo-całkowe. Te pierwsze równania opisują zagadnienia z biologii, biofizyki, biochemii, chemii, medycyny, ekologii, ekonomii, teorii sterowania, reakcji jądrowych, a te drugie uwzględniają tzw. całkowite źródła [84, 89]. W tym rozdziale nie będę skupiał się na konkretnym modelu, ale rozważę sytuację ogólną czyli abstrakcyjną, podając jednocześnie kilka ważnych przykładów równań zarówno różniczkowych jak i różniczkowo-funkcyjnych, dla których wszystkie przyjęte przeze mnie założenia są spełnione. Przedstawię twierdzenia dotyczące zbieżności i stabilności jawnych i niejawnych metod różnicowych oraz własności rozwiązań dyskretnych dla wspomnianych równań z warunkiem początkowym oraz warunkami brzegowymi typu Dirichleta i Robina. Chciałbym jeszcze zwrócić uwagę, że do dokładniejszego modelowania zjawisk

w ośrodkach anizotropowych można używać pochodnych przestrzennych mieszanych, które występują w badanych równaniach. Ale nawet równania tylko z pochodnymi czystymi, jak np. równanie ciepła, po dokonaniu zamiany zmiennych często generują pochodne mieszane. W teorii metod różnicowych zamiany zmiennych dokonuje się w celu przekształcenia dziedziny funkcji szukanej najczęściej na prostopadłościan, co ułatwia aproksymację i zwiększa dokładność obliczeniową.

Rozważmy równanie różniczkowe

$$\partial_t z(t, x) = \sum_{i=1}^n \partial_{x_i x_i} a(z(t, x)) + \sum_{i=1}^n \partial_{x_i} b(z(t, x)) + c(z(t, x)), \quad (105)$$

gdzie funkcje $a, b, c : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ są dane. W zastosowaniach, składnik z pochodną drugiego rzędu po prawej stronie w (105) odpowiada dyfuzji lub dyspersji, składnik z pochodną pierwszego rzędu reprezentuje konwekcję lub adwekcję, a ostatni składnik opisuje procesy reakcji, takie jak sorpcja, źródło lub zlew. Funkcja szukana z jest zwykle nieujemną biologiczną, medyczną, fizyczną lub chemiczną wielkością, taką jak gęstość, nasycenie lub stężenie. Dużo znanych równań postaci (105) z wielomianową prawą stroną jest opisane w [1, 36, 42, 69]. Jest to w szczególności jednowymiarowe uogólnione równanie Burgersa–Huxley’a

$$\partial_t z(t, x) = \kappa \partial_{xx} z(t, x) + \alpha (z(t, x))^p \partial_x z(t, x) + \beta z(t, x) [1 - (z(t, x))^p] [(z(t, x))^p - \gamma], \quad (106)$$

jednowymiarowe uogólnione równanie Burgersa–Fishera

$$\partial_t z(t, x) = \kappa \partial_{xx} z(t, x) + \alpha (z(t, x))^p \partial_x z(t, x) + \beta z(t, x) [1 - (z(t, x))^p] \quad (107)$$

oraz wielowymiarowe równanie reakcji-dyfuzji

$$\partial_t z(t, x) = \sum_{i=1}^n \partial_{x_i x_i} (z(t, x))^m - \beta (z(t, x))^\delta, \quad (108)$$

gdzie $\kappa > 0$, $\alpha \in \mathbb{R}$, $\beta \geq 0$, $\gamma \in (0, 1)$, $p \in \mathbb{N}$, $m > 0$, $\delta > 0$. Równanie (106) obejmuje wiele modeli z biologii matematycznej i fizyki, w tym kilka równań z dynamiki populacji i fizyki jądrowej. Kładąc $\alpha = 0$, $\kappa = \beta = p = 1$ w (107), otrzymujemy równanie Fishera, które jest archetypowym deterministycznym modelem ewolucji korzystnego genu w populacji diploidalnych osobników żyjących w jednowymiarowym środowisku. Równanie (108) jest prostym i szeroko stosowanym modelem dla różnych problemów fizycznych, chemicznych i biologicznych związanych z rozpraszaniem, źródłem lub absorpcją, np. modeluje się nim filtrację w ośrodkach porowatych, transport energii cieplnej w płazmie, przepływ chemicznie reagującego płynu z powierzchni oraz ewolucję populacji. Równania (106), (107), (108) dla pewnych wartości parametrów spełniają wszystkie założenia w moich twierdzeniach w [A5] lub [A1], które niżej przedstawię. Warto jeszcze dodać, że równania Newella–Whiteheada, Zeldovicha, KPP i inne badane w [36, 69] są również postaci (105) i spełniają te założenia.

Przykładem równania nielokalnego, które spełnia założenia w twierdzeniach w [A5] jest całkowita postać układu FitzHugha–Nagumo (87)

$$u_t - u_{xx} = -f(u) - b \int_0^t u(s, x) ds - v_0(x), \quad (109)$$

gdzie v_0 jest zadany warunkiem początkowym dla równania kinetycznego [68].

[A1] W tej pracy udowodniłem twierdzenia 6.1 i 6.2 o oszacowaniu błędu i jednostajnej zbieżności jawnych metod różnicowych dla nieliniowych i quasi-liniowych parabolicznych w sensie Waltera równań różniczkowo-funkcyjnych z warunkiem początkowym i warunkiem brzegowym typu Dirichleta. Ponadto z uwagi 6.5 wnioskujemy o asymptotyce błędu, a z uwagi 6.2 wynika, że metody są stabilne. Mogą to być w szczególności równania silnie nieliniowe

czyli nieliniowe względem drugich pochodnych. Uogólniłem warunek Perrona (patrz (118)) zakładany we wszystkich wcześniejszych pracach z grupy Kamonta [15, 16, 46, 47, 48] oraz jego szczególny przypadek tj. warunek Lipschitza zakładany z kolei we wszystkich wcześniejszych pracach z grupy Malca [64, 65, 66] i Pao [73]. Pozwoliło to rozszerzyć klasę równań nieliniowych o te z członami quasi-liniowymi $\sum_{i,j=1}^n a_{ij}(t, x, z) \partial_{x_i x_j} z$, gdzie funkcje $a_{ij} : E \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ są zadane, oraz dopuściło układy równań silnie nieliniowych i quasi-liniowych na podstawie uwagi 6.3. Jak wiadomo człon quasi-liniowe często występują w równaniach modelujących dyfuzję. Przeanalizowałem też, dowodząc lematy 6.2 i 6.3, szybkość aproksymacji członu funkcyjnego w równaniach różniczkowych operatorem schodkowym S_h zdefiniowanym przez Malca [64] i operatorem interpolacyjnym T_h zdefiniowanym przez Kamonta [47]. Konkluzja jest taka, że w klasie funkcji $z \in C^1(\Omega, \mathbb{R})$ rząd aproksymacji w obu przypadkach jest równy jeden, ale już w klasie $z \in C^2(\Omega, \mathbb{R})$ rząd aproksymacji operatorem T_h jest równy dwa, podczas gdy operatorem S_h pozostaje równy jeden. To właśnie wyniki uzyskane w tym artykule zainspiowały mnie do dalszej pracy zarówno z równaniami ogólnymi [B6], [B7], [B8], [B9], [A5], jak i z bardzo konkretnymi, modelującymi zjawiska dyfuzji i transportu, które opisałem w rozdziałach 2, 3, 4.

Niech $T > 0$, $T_0 \geq 0$, $X = (X_1, \dots, X_n)$, $\tau = (\tau_1, \dots, \tau_n)$, gdzie $X_i > 0$, $\tau_i \geq 0$ dla $i = 1, \dots, n$, będą dane. Definiujemy zbiory

$$\begin{aligned}\Xi &= (-X_1, X_1) \times \dots \times (-X_n, X_n) \subset \mathbb{R}^n, \\ \bar{\Xi} &= [-X - \tau, X + \tau], \quad \partial\Xi = \bar{\Xi} \setminus \Xi, \\ E &= [0, T] \times \Xi \subset \mathbb{R}^{1+n}, \\ E_0 &= [-T_0, 0] \times \bar{\Xi} \subset \mathbb{R}^{1+n}, \\ \partial_0 E &= (0, T] \times \partial\Xi \subset \mathbb{R}^{1+n}, \\ \Omega &= E \cup E_0 \cup \partial_0 E, \\ \Omega_t &= \Omega \cap ([-T_0, t] \times \mathbb{R}^n), \quad t \in [0, T].\end{aligned}$$

Symbolem $M_{n \times n}$ oznaczamy zbiór rzeczywistych symetrycznych macierzy kwadratowych $n \times n$. Definiujemy zbiory

$$\begin{aligned}\Delta_f &= E \times B(\Omega, \mathbb{R}) \times \mathbb{R}^n \times M_{n \times n}, \\ \Delta_{f1} &= E \times B^2(\Omega, \mathbb{R}) \times \mathbb{R}^{2n} \times M_{n \times n}^2,\end{aligned}$$

gdzie

$$\begin{aligned}B(\Omega, \mathbb{R}) &= \{z : \Omega \rightarrow \mathbb{R} \mid \sup \{|z(t, x)| : (t, x) \in \Omega\} < \infty, \\ &\exists k \in \mathbb{N} \exists \Omega_1, \dots, \Omega_k \exists a^{(1)}, \dots, a^{(k)}, a \in \mathbb{R} \exists b^{(1)}, \dots, b^{(k)}, b \in \mathbb{R}^n : \\ &\Omega_i = \Omega \cap ([a^{(i)}, a^{(i)} + a] \times [b^{(i)}, b^{(i)} + b])\}, \\ \Omega &= \bigcup_{i=1}^k \Omega_i, \quad \Omega_i \cap \Omega_j = \emptyset \text{ for } i \neq j, \quad z|_{\Omega_i} \in C(\Omega_i, \mathbb{R}), \quad i, j = 1, \dots, k\end{aligned}$$

jest zbiorem funkcji mierzalnych w sensie Lebesgue'a, ograniczonych i kawałkami ciągłych w Ω . Normy maksimum w przestrzeniach $\mathbb{R}^n$ i $M_{n \times n}$ oznaczamy przez $\|\cdot\|$, a w przestrzeni funkcji ograniczonych $B(\Omega, \mathbb{R})$ przez $\|\cdot\|_\Omega$. Dla ustalonego $t \in [0, T]$ relacja

$$\|z\|_{\Omega_t} = \max \left\{ |z(\tilde{t}, x)| : (\tilde{t}, x) \in \Omega_t \right\}, \quad z \in B(\Omega, \mathbb{R})$$

oznacza seminormę w $B(\Omega, \mathbb{R})$. Niech funkcje $f : \Delta_f \rightarrow \mathbb{R}$ i $\varphi : E_0 \cup \partial_0 E \rightarrow \mathbb{R}$ będą dane. Rozważamy nieliniowe równanie różniczkowo-funkcyjne cząstkowe drugiego rzędu postaci

$$\partial_t z(t, x) = f(t, x, z, \partial_x z(t, x), \partial_{xx} z(t, x)), \quad (t, x) \in E, \quad (110)$$

z warunkiem początkowym i warunkiem brzegowym typu Dirichleta

$$z(t, x) = \varphi(t, x), \quad (t, x) \in E_0 \cup \partial_0 E, \quad (111)$$

gdzie $\partial_x z = (\partial_{x_1} z, \dots, \partial_{x_n} z)$, $\partial_{xx} z = [\partial_{x_i x_j} z]_{i,j=1}^n$. Mówimy, że równanie (110) jest *paraboliczne w sensie Waltera*, gdy dla dowolnych macierzy $q, \tilde{q} \in M_{n \times n}$ i dla każdego $(t, x) \in E$, $z \in B(\Omega, \mathbb{R})$, $p \in \mathbb{R}^n$ prawdziwa jest implikacja

$$q \leq \tilde{q} \Rightarrow f(t, x, z, p, q) \leq f(t, x, z, p, \tilde{q}),$$

gdzie nierówność $q \leq \tilde{q}$ oznacza, że macierz $\tilde{q} - q$ jest półokreślona dodatnio (patrz [86], §23). Funkcja f spełnia *warunek Volterry*, gdy dla dowolnych $(t, x) \in E$, $z, \bar{z} \in B(\Omega, \mathbb{R})$ i dla każdego $p \in \mathbb{R}^n$, $q \in M_{n \times n}$ ma miejsce implikacja

$$z|_{\Omega_t} = \bar{z}|_{\Omega_t} \Rightarrow f(t, x, z, p, q) = f(t, x, \bar{z}, p, q).$$

Dyskretyzujemy zbiór Ω w następujący sposób. Niech $(h_0, h') = h$, $h' = (h_1, \dots, h_n)$ będą krokami siatki. Oznaczamy przez H zbiór wszystkich kroków h takich, że istnieje $N_0 \in \mathbb{Z}$ oraz $N = (N_1, \dots, N_n) \in \mathbb{N}^n$ o własności: $N_0 h_0 = T_0$, $N_i h_i = X_i + \tau_i$, $i = 1, \dots, n$. Przez $K_0 \in \mathbb{N}$ i $K = (K_1, \dots, K_n) \in \mathbb{Z}^n$ rozumiemy liczby takie, że $K_0 h_0 \leq T < (K_0 + 1) h_0$, $K_i h_i < X_i \leq (K_i + 1) h_i$, $i = 1, \dots, n$. Węzły siatki $(t^{(\mu)}, x^{(m)})$, $x^{(m)} = (x_1^{(m_1)}, \dots, x_n^{(m_n)})$ określamy następująco: $t^{(\mu)} = \mu h_0$, $x_i^{(m_i)} = m_i h_i$, $i = 1, \dots, n$. Dla $h \in H$ definiujemy zbiory dyskretne

$$\begin{aligned} R_h^{1+n} &= \left\{ (t^{(\mu)}, x^{(m)}) : (\mu, m) \in \mathbb{Z}^{1+n} \right\}, \\ E_h &= E \cap R_h^{1+n}, \\ E_{0,h} &= E_0 \cap R_h^{1+n}, \\ \partial_0 E_h &= \partial_0 E \cap R_h^{1+n}, \\ \Omega_h &= E_h \cup E_{0,h} \cup \partial_0 E_h, \\ \Omega_{h,\mu} &= \Omega_h \cap \left([-T_0, t^{(\mu)}] \times \mathbb{R}^n \right), \quad \mu = 0, \dots, K_0, \\ E_h^+ &= \left\{ (t^{(\mu)}, x^{(m)}) \in E_h : 0 \leq \mu \leq K_0 - 1 \right\}. \end{aligned}$$

Dla dowolnej funkcji siatkowej $z : \Omega_h \supset \tilde{\Omega}_h \rightarrow \mathbb{R}$ i punktu $(t^{(\mu)}, x^{(m)}) \in \tilde{\Omega}_h$ przyjmujemy oznaczenia: $z^{(\mu,m)} := z(t^{(\mu)}, x^{(m)})$, $|z|^{(\mu,m)} := |z^{(\mu,m)}|$. Symbol $z|_{\tilde{\Omega}_h}$ oznacza restrykcję funkcji siatkowej z do zbioru $\tilde{\Omega}_h$. Przestrzeń wszystkich funkcji siatkowych oznaczamy przez $\mathfrak{F}(\tilde{\Omega}_h, \mathbb{R})$ i wprowadzamy normę maksimum

$$\|z\|_{\tilde{\Omega}_h} = \max \left\{ |z|^{(\mu,m)} : (t^{(\mu)}, x^{(m)}) \in \tilde{\Omega}_h \right\}, \quad z \in \mathfrak{F}(\tilde{\Omega}_h, \mathbb{R}). \quad (112)$$

Dla ustalonego $\mu \in \{0, 1, \dots, K_0\}$ związek

$$\|z\|_{\Omega_{h,\mu}} = \max \left\{ |z|^{(\tilde{\mu},m)} : (t^{(\tilde{\mu})}, x^{(m)}) \in \Omega_{h,\mu} \right\}, \quad z \in \mathfrak{F}(\Omega_h, \mathbb{R}) \quad (113)$$

oznacza seminormę w $\mathfrak{F}(\Omega_h, \mathbb{R})$. Definiujemy zbiór indeksów

$$\Gamma = \{(i, j) : 1 \leq i, j \leq n, i \neq j\}$$

i zakładamy, że $\Gamma_+, \Gamma_- \subset \Gamma$ są dowolnymi podzbiórmi takimi, że $\Gamma_+ \cup \Gamma_- = \Gamma$, $\Gamma_+ \cap \Gamma_- = \emptyset$ (w szczególności dopuszcza się $\Gamma_+ = \emptyset$ lub $\Gamma_- = \emptyset$). Zakładamy, że jeśli $(i, j) \in \Gamma_+$, to $(j, i) \in \Gamma_+$ i jeśli $(i, j) \in \Gamma_-$, to $(j, i) \in \Gamma_-$. Niech $z \in \mathfrak{F}(\Omega_h, \mathbb{R})$ i $(t^{(\mu)}, x^{(m)}) \in E_h$. Definiujemy ilorazy różnicowe przednie i wsteczny, odpowiednio,

$$\begin{aligned}
\delta_0 z^{(\mu,m)} &= \frac{1}{h_0} [z^{(\mu+1,m)} - z^{(\mu,m)}], \\
\delta_i^+ z^{(\mu,m)} &= \frac{1}{h_i} [z^{(\mu,m+e_i)} - z^{(\mu,m)}], \quad i = 1, \dots, n, \\
\delta_i^- z^{(\mu,m)} &= \frac{1}{h_i} [z^{(\mu,m)} - z^{(\mu,m-e_i)}], \quad i = 1, \dots, n,
\end{aligned} \tag{114}$$

gdzie $e_i = (0, \dots, 0, 1, 0, \dots, 0)$ z 1 na i -tej współrzędnej. I dalej definiujemy ilorazy różnicowe centralne i tzw. siedmiopunktowe $\delta = (\delta_1, \dots, \delta_n)$, $\delta^{(2)} = [\delta_{ij}]_{i,j=1}^n$,

$$\begin{aligned}
\delta_i z^{(\mu,m)} &= \frac{1}{2} [\delta_i^+ z^{(\mu,m)} + \delta_i^- z^{(\mu,m)}], \quad i = 1, \dots, n, \\
\delta_{ii} z^{(\mu,m)} &= \delta_i^+ \delta_i^- z^{(\mu,m)}, \quad i = 1, \dots, n, \\
\delta_{ij} z^{(\mu,m)} &= \frac{1}{2} [\delta_i^+ \delta_j^- z^{(\mu,m)} + \delta_i^- \delta_j^+ z^{(\mu,m)}], \quad (i, j) \in \Gamma_-, \\
\delta_{ij} z^{(\mu,m)} &= \frac{1}{2} [\delta_i^+ \delta_j^+ z^{(\mu,m)} + \delta_i^- \delta_j^- z^{(\mu,m)}], \quad (i, j) \in \Gamma_+.
\end{aligned} \tag{115}$$

Niech funkcja $\varphi_h \in \mathfrak{F}(E_{0,h} \cup \partial_0 E_h, \mathbb{R})$ będzie dana. Definiujemy jawny schemat różnicowo-funkcyjny

$$\begin{cases} \delta_0 z^{(\mu,m)} = f(t^{(\mu)}, x^{(m)}, G_h[z], \delta z^{(\mu,m)}, \delta^{(2)} z^{(\mu,m)}), & (t^{(\mu)}, x^{(m)}) \in E_h, \\ z^{(\mu,m)} = \varphi_h^{(\mu,m)}, & (t^{(\mu)}, x^{(m)}) \in E_{0,h} \cup \partial_0 E_h, \end{cases} \tag{116}$$

gdzie $G_h = S_h$ lub $G_h = T_h$.

Założenie F[f, u]

(F₁) Funkcja f zmiennych $(t, x, z, p, q) \in \Delta_f$ jest ciągła.

(F₂) Istnieją funkcje ograniczone $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_n)$, $\beta = [\beta_{ij}]_{i,j=1}^n$, gdzie $\alpha_i, \beta_{ij} : \Delta_{f1} \rightarrow \mathbb{R}$ są takie, że dla każdego $(t, x, z, p, q), (t, x, z, \bar{p}, \bar{q}) \in \Delta$

$$f(t, x, z, p, q) - f(t, x, z, \bar{p}, \bar{q}) = \sum_{i=1}^n \alpha_i(P) (p_i - \bar{p}_i) + \sum_{i,j=1}^n \beta_{ij}(P) (q_{ij} - \bar{q}_{ij}),$$

gdzie $P = (t, x, z, z, p, \bar{p}, q, \bar{q}) \in \Delta_{f1}$.

(F₃) Macierz β jest symetryczna oraz

$$\beta_{ij}(P) \geq 0 \quad \text{ i } \quad \beta_{ij}(P) \neq 0, \quad (i, j) \in \Gamma_+,$$

$$\beta_{ij}(P) \leq 0, \quad (i, j) \in \Gamma_-,$$

dla każdego $P \in \Delta_{f1}$.

(F₄) Istnieją funkcje $\sigma : [0, T] \times \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}_+$, $\rho : \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}_+$ o własnościach:

- (1) σ jest ciągła i niemalejąca względem obu zmiennych, $\sigma(t, 0) = 0$ dla $t \in [0, T]$;
- (2) ρ jest niemalejąca;
- (3) dla każdego $c \geq 0$, $\varepsilon, \varepsilon_0 \geq 0$ maksymalne rozwiązanie problemu Cauchy'ego

$$\omega'(t) = c\sigma(t, \omega(t)) + \varepsilon, \quad \omega(0) = \varepsilon_0 \quad (117)$$

jest określone na $[0, T]$ i funkcja $\tilde{\omega}(t) = 0, t \in [0, T]$ jest maksymalnym rozwiązaniem (117) dla $c \geq 0, \varepsilon, \varepsilon_0 = 0$;

(4) spełniony jest *uogólniony warunek Perrona*

$$|f(t, x, z, p, q) - f(t, x, \bar{z}, p, q)| \leq \rho(\|q\|) \sigma(t, \|z - \bar{z}\|_{\Omega_t}) \quad (118)$$

dla każdego $(t, x, z, p, q), (t, x, \bar{z}, p, q) \in \Delta_f$.

(F_5) $u \in C(\Omega, \mathbb{R}) \cap C^{1,2}(\bar{E}, \mathbb{R})$ jest rozwiązaniem problemu różniczkowo-funkcyjnego (110), (111).

Założenie S $[f, h]$

(S_1) Kroki siatki $h = (h_0, h') \in H$ są takie, że:

$$1 - 2h_0 \sum_{i=1}^n \frac{1}{h_i^2} \beta_{ii}(P) + h_0 \sum_{(i,j) \in \Gamma} \frac{1}{h_i h_j} |\beta_{ij}(P)| \geq 0, \quad (119)$$

$$-\frac{h_i}{2} |\alpha_i(P)| + \beta_{ii}(P) - h_i \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n \frac{1}{h_j} |\beta_{ij}(P)| \geq 0, \quad (120)$$

dla każdego $P \in \Delta_{f1}, i = 1, \dots, n$.

(S_2) Istnieje $c_0 > 0$ takie, że $h_i h_j^{-1} \leq c_0, i, j = 1, \dots, n$.

Twierdzenie 19 ([A1], tw. 6.1). *Przypuśćmy, że spełnione są założenia $F[f, u], S[f, h]$ i istnieje funkcja $\gamma_0 : H \rightarrow \mathbb{R}_+$ taka, że*

$$|\varphi^{(\mu, m)} - \varphi_h^{(\mu, m)}| \leq \gamma_0(h), \quad (t^{(\mu)}, x^{(m)}) \in E_{0,h} \cup \partial_0 E_h, \quad \lim_{h \rightarrow 0} \gamma_0(h) = 0. \quad (121)$$

Wówczas:

(i) dla każdego $h \in H$ istnieje jedyne rozwiązanie $v \in \mathfrak{F}(\Omega_h, \mathbb{R})$ schematu różnicowo-funkcyjnego (116),

(ii) istnieje funkcja $\alpha : H \rightarrow \mathbb{R}_+$ taka, że

$$\|U - v\|_{\Omega_{h,\mu}} \leq \alpha(h), \quad 0 \leq \mu \leq K_0, \quad \lim_{h \rightarrow 0} \alpha(h) = 0, \quad (122)$$

gdzie $U := u|_{\Omega_h}$, tzn. że metoda różnicowa jest jednostajnie zbieżna.

Twierdzenie 19 o zbieżności metody różnicowej udowodniłem, korzystając z dyskretnego twierdzenia porównawczego 5.1. W (F_3), które jest jednocześnie definicją zbiorów Γ_+ i Γ_- , zakłada się stałość znaku funkcji β_{ij} w Δ_{f1} dla ustalonego $(i, j) \in \Gamma$. Dla równań quasi-liniowych, tj. generowanych przez funkcję

$$f(t, x, z, p, q) = \sum_{i,j=1}^n a_{ij}(t, x, z) q_{ij} + F(t, x, z, p), \quad (t, x, z, p, q) \in \Delta_f,$$

założenie o stałości znaku, w tym przypadku współczynników a_{ij} , można pominąć. W tym celu modyfikujemy definicję ilorazów siedmiopunktowych, określając je w trakcie procesu obliczeniowego wzorem

$$\delta_{ij} z^{(\mu, m)} = \frac{1}{2} [\delta_i^+ \delta_j^- z^{(\mu, m)} + \delta_i^- \delta_j^+ z^{(\mu, m)}], \quad \text{jeśli } a_{ij}(t^{(\mu)}, x^{(m)}, G_h[z]) < 0, \quad (123)$$

$$\delta_{ij}z^{(\mu,m)} = \frac{1}{2} \left[\delta_i^+ \delta_j^+ z^{(\mu,m)} + \delta_i^- \delta_j^- z^{(\mu,m)} \right], \quad \text{jeśli } a_{ij} \left(t^{(\mu)}, x^{(m)}, G_h[z] \right) \geq 0.$$

Wówczas analogiczne twierdzenie jak twierdzenie 19 jest prawdziwe (zobacz twierdzenie 6.2).

[A5] W tej pracy udowodniłem twierdzenie 4.1 o oszacowaniu rozwiązań nieliniowego parabolicznego w sensie Waltera równania różniczkowo-funkcyjnego z warunkiem początkowym i warunkiem brzegowym typu Robina, twierdzenie 4.2 o istnieniu, jednoznaczności i oszacowaniu jednostajnym względem siatek (tj. niezależnym od siatek) rozwiązań skojarzonych niejawnych schematów różnicowych, a także twierdzenie 5.1 o oszacowaniu błędu i jednostajnej zbieżności skonstruowanej metody różnicowej. Ponadto z uwagi 5.3 wnioskujemy o asymptotyce błędu, a z uwagi 5.4 wynika, że metoda jest stabilna. Mogą to być w szczególności równania silnie nieliniowe oraz układy równań silnie nieliniowych i quasi-liniowych, jak zauważyłem w uwadze 5.5. Z uwagi 6.1 wynika, że analogiczne twierdzenia są prawdziwe dla równań quasi-liniowych z ilorazami różnicowymi siedmiopunktowymi zmodyfikowanymi wzorem (123) na poziomie $\mu + 1$, tak jak w [A1]. Pomocniczo wykazałem twierdzenie 3.1 o istnieniu, jednoznaczności i oszacowaniu rozwiązań pewnego dyskretnego niejawnego równania funkcyjnego z warunkiem początkowo-brzegowym oraz twierdzenie porównawcze 3.2. Istotną nowością w tym artykule jest lokalne założenie na kroki siatki, tj. na zbiorze Δ_f^* , w konstrukcji którego kluczowe jest wyznaczenie przedziału $R \subset \mathbb{R}$, co realizuje się, rozwiązując porównawcze zwyczajne zagadnienia początkowe (128) i (132). We wszystkich wcześniejszych pracach z tej tematyki założenie to było przyjmowane globalnie, tj. na zbiorze Δ_f [15, 16, 46, 47, 48, 49, 50, 64, 65, 66, 72, 73]. Uogólniony warunek Perrona (137) na zbiorze Δ_f^* wprowadziłem w [B8], a w wersji mniej ogólnej tzn. z $\rho_1(\|q\|)$ zamiast $\rho_1(\|p\|, \|q\|)$ w [B7]. W ten sposób dopuszczamy w szczególności ważne równania z członami wielomianowymi względem z i $\partial_{x_i}z$, np. $z\partial_{x_i}z$ oraz z członami quasi-liniowymi $\sum_{i,j=1}^n a_{ij}(t, x, z)\partial_{x_i x_j}z$, gdzie funkcje $a_{ij} : E \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ są zadane, które są typowe w modelach dyfuzji. Jak już napisałem wcześniej, np. równania (106), (107), (108) dla odpowiednich wartości parametrów spełniają wszystkie założenia w twierdzeniach w tej pracy. W modelach dyfuzji często zakłada się na brzegu zbioru Ω warunki brzegowe Robina, a nawet ich nieliniowe modyfikacje, jak np. to miało miejsce w rozdziałach 2 i 3.

Uzupełniamy oznaczenia z [A1]. Przyjmujemy, że $\tau = 0$, co oznacza, iż nie pogrubiamy brzegu $\partial_0 E$. Wynika to z faktu, że teraz w warunku brzegowym występują pochodne. Dzielimy brzeg $\partial_0 E$ na rozłączne zbiory:

$$\begin{aligned} \partial\Xi_i &= \{x \in \partial\Xi : x_i = X_i\}, \quad \partial\Xi_{n+i} = \{x \in \partial\Xi : x_i = -X_i\}, \\ S_i^+ &= \partial\Xi_i \setminus \bigcup_{j=1}^{i-1} \partial\Xi_j, \quad S_i^- = \partial\Xi_{n+i} \setminus \bigcup_{j=1}^{n+i-1} \partial\Xi_j, \\ \partial_0 E_i^+ &= (0, T] \times S_i^+, \quad \partial_0 E_i^- = (0, T] \times S_i^-, \quad i = 1, \dots, n. \end{aligned}$$

Zbiór funkcji ograniczonych $B(\Omega, \mathbb{R})$ w definicji zbiorów Δ_f, Δ_{f1} zastępujemy zbiorem funkcji ciągłych $C(\Omega, \mathbb{R})$ i określamy jeszcze zbiory

$$\begin{aligned} C(\Omega, R) &= \{z : \Omega \rightarrow R\} \cap C(\Omega, \mathbb{R}), \\ \mathfrak{F}(\tilde{\Omega}_h, R) &= \{z : \tilde{\Omega}_h \rightarrow R\} \cap \mathfrak{F}(\tilde{\Omega}_h, \mathbb{R}), \end{aligned}$$

gdzie $R \subset \mathbb{R}$ jest zadany przedziałem, zaś $\tilde{\Omega}_h \subset \Omega_h$ dowolnym podzbiorem. Niech funkcje $f : \Delta_f \rightarrow \mathbb{R}$, $\varphi : E_0 \rightarrow \mathbb{R}$, $a, b, \psi : \partial_0 E \rightarrow \mathbb{R}$ będą dane. Rozważamy nieliniowe równanie różniczkowo-funkcyjne cząstkowe drugiego rzędu postaci

$$\partial_t z(t, x) = f(t, x, z, \partial_x z(t, x), \partial_{xx} z(t, x)), \quad (t, x) \in E, \quad (124)$$

z warunkiem początkowym i nieliniowymi warunkami brzegowymi typu Robina

$$z(t, x) = \varphi(t, x), \quad (t, x) \in E_0, \quad (125)$$

$$\begin{aligned} a(t, x)z(t, x) + b(t, x)\partial_{x_i}z(t, x) &= \psi(t, x), \quad (t, x) \in \partial_0 E_i^+, \quad i = 1, \dots, n, \\ a(t, x)z(t, x) - b(t, x)\partial_{x_i}z(t, x) &= \psi(t, x), \quad (t, x) \in \partial_0 E_i^-, \quad i = 1, \dots, n. \end{aligned} \quad (126)$$

Dyskretyzujemy zbiory brzegowe

$$\partial_0 E_{h,i}^+ = \partial_0 E_i^+ \cap R_h^{1+n}, \quad \partial_0 E_{h,i}^- = \partial_0 E_i^- \cap R_h^{1+n}, \quad i = 1, \dots, n.$$

Określamy jeszcze operator interpolacyjny $G_h : \mathfrak{F}(\Omega_h, \mathbb{R}) \rightarrow C(\Omega, \mathbb{R})$, który ma następujące własności:

(1) dla każdego $z \in C(\Omega, \mathbb{R}) \cap C^{1,2}(\bar{E}, \mathbb{R})$

$$\lim_{h \rightarrow 0} \|G_h[Z] - z\|_\Omega = 0,$$

gdzie $Z := z|_{\Omega_h}$ jest restrykcją z do Ω_h ,

(2) spełniony jest warunek Lipschitza ze stałą $D_1 > 0$

$$\|G_h[z] - G_h[\bar{z}]\|_{\Omega_{t(\mu)}} \leq D_1 \|z - \bar{z}\|_{\Omega_{h,\mu}}, \quad z, \bar{z} \in \mathfrak{F}(\Omega_h, \mathbb{R}), \quad \mu = 0, \dots, K_0,$$

(3) dla każdego $z, \bar{z} \in \mathfrak{F}(\Omega_h, \mathbb{R})$ jeśli $z|_{\Omega_{h,\mu}} = \bar{z}|_{\Omega_{h,\mu}}$, to $G_h[z]|_{\Omega_{t(\mu)}} = G_h[\bar{z}]|_{\Omega_{t(\mu)}}$, $\mu = 0, \dots, K_0$,

(4) spełniony jest warunek wzrostu

$$\|G_h[z]\|_{\Omega_{t(\mu)}} \leq \|z\|_{\Omega_{h,\mu}}, \quad z \in \mathfrak{F}(\Omega_h, \mathbb{R}), \quad \mu = 0, \dots, K_0.$$

Szczególnym przypadkiem G_h jest T_h z $D_1 = 1$. Niech funkcje $\varphi_h \in \mathfrak{F}(E_{0,h}, \mathbb{R})$, $\psi_h \in \mathfrak{F}(\partial_0 E_h, \mathbb{R})$ będą dane i niech $A_h := a|_{\partial_0 E_h}$, $B_h := b|_{\partial_0 E_h}$. Definiujemy niejawny schemat różnicowo-funkcyjny

$$\begin{cases} \delta_0 z^{(\mu,m)} = f(t^{(\mu)}, x^{(m)}, G_h[z], \delta z^{(\mu+1,m)}, \delta^{(2)} z^{(\mu+1,m)}), & \begin{pmatrix} t^{(\mu)}, x^{(m)} \end{pmatrix} \in E_h, \\ z^{(\mu,m)} = \varphi_h^{(\mu,m)}, & \begin{pmatrix} t^{(\mu)}, x^{(m)} \end{pmatrix} \in E_{0,h}, \\ A_h^{(\mu,m)} z^{(\mu,m)} + B_h^{(\mu,m)} \delta_i^- z^{(\mu,m)} = \psi_h^{(\mu,m)}, & \begin{pmatrix} t^{(\mu)}, x^{(m)} \end{pmatrix} \in \partial_0 E_{h,i}^+, \quad i = 1, \dots, n, \\ A_h^{(\mu,m)} z^{(\mu,m)} - B_h^{(\mu,m)} \delta_i^+ z^{(\mu,m)} = \psi_h^{(\mu,m)}, & \begin{pmatrix} t^{(\mu)}, x^{(m)} \end{pmatrix} \in \partial_0 E_{h,i}^-, \quad i = 1, \dots, n. \end{cases} \quad (127)$$

Założenie $G[f, a, b, \varphi]$

(G_1) Istnieje funkcja $\sigma : [0, T] \times \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}_+$ o własnościach:

- (1) σ jest ciągła i niemalejąca względem obu zmiennych;
- (2) maksymalne rozwiązanie $\tilde{\omega}$ problemu Cauchy'ego

$$\omega'(t) = \sigma(t, \omega(t)), \quad \omega(0) = \|\varphi\|_{E_0} \quad (128)$$

jest określone na $[0, T]$;

- (3) spełniony jest warunek wzrostu

$$|f(t, x, z, 0, 0)| \leq \sigma(t, \|z\|_{\Omega_t}) \quad (129)$$

dla każdego $(t, x) \in E$, $z \in C(\Omega, \mathbb{R})$.

(G_2) Równanie (124) jest paraboliczne w sensie Waltera.

(G_3) Funkcje a, b są ciągłe, $a > 0$, $b \geq 0$.

Twierdzenie 20 ([A5], tw. 4.1). *Jeśli założenie $G[f, a, b, \varphi]$ jest spełnione, $u \in C(\Omega, \mathbb{R}) \cap C^{1,2}(\bar{E}, \mathbb{R})$ jest rozwiązaniem problemu różniczkowo-funkcyjnego (124)–(126) oraz*

$$|\psi(t, x)| \leq a(t, x)\tilde{\omega}(t), \quad (t, x) \in \partial_0 E, \quad (130)$$

to prawdziwe jest oszacowanie

$$|u(t, x)| \leq \tilde{\omega}(t), \quad (t, x) \in \Omega, \quad (131)$$

gdzie $\tilde{\omega}$ jest maksymalnym rozwiązaniem problemu (128).

Założenie $F[f, a, b, \varphi, \varphi_h, \psi_h]$

(F_1) Funkcja f zmiennych $(t, x, z, p, q) \in \Delta_f$ jest typu Volterry.

(F_2) Istnieje stała $\Phi \geq 0$ taka, że dla każdego $h \in H$

$$\max\{\|\varphi_h\|_{E_{0,h}}, \|\psi_h/A_h\|_{\partial_0 E_h}\} \leq \Phi.$$

(F_3) $G[f, a, b, \varphi]$ jest spełnione i maksymalne rozwiązanie $\bar{\omega}$ problemu Cauchy'ego

$$\omega'(t) = \sigma(t, \omega(t)), \quad \omega(0) = \Phi \quad (132)$$

jest określone na $[0, T]$.

(F_4) Istnieją ograniczone pochodne

$$\partial_p f = (\partial_{p_1} f, \dots, \partial_{p_n} f), \quad \partial_q f = [\partial_{q_{ij}} f]_{i,j=1}^n$$

w zbiorze $\Delta_f^* = E \times C(\Omega, R) \times \mathbb{R}^n \times M_{n \times n}$, gdzie

$$R := [-\omega^*(T), \omega^*(T)], \quad \omega^*(T) := \max\{\tilde{\omega}(T), \bar{\omega}(T)\}. \quad (133)$$

(F_5) Macierz $\partial_q f$ jest symetryczna oraz

$$\partial_{q_{ij}} f(P) \geq 0 \quad \text{ i } \quad \partial_{q_{ij}} f(P) \neq 0, \quad (i, j) \in \Gamma_+,$$

$$\partial_{q_{ij}} f(P) \leq 0, \quad (i, j) \in \Gamma_-,$$

dla każdego $P \in \Delta_f^*$.

Założenie S $[f, h]$

(S_1) Kroki siatki $h = (h_0, h') \in H$ są takie, że

$$-\frac{h_i}{2} |\partial_{p_i} f(P)| + \partial_{q_{ii}} f(P) - h_i \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n \frac{1}{h_j} |\partial_{q_{ij}} f(P)| \geq 0 \quad (134)$$

dla każdego $P \in \Delta_f^*$, $i = 1, \dots, n$.

(S_2) $\lim_{h \rightarrow 0} \frac{h_i}{h_0} = 0$, $i = 1, \dots, n$.

(S₃) Istnieje $c_0 > 0$ takie, że $h_i h_j^{-1} \leq c_0$, $i, j = 1, \dots, n$.

Twierdzenie 21 ([A5], tw. 4.2). *Jeśli założenia $F[f, a, b, \varphi, \varphi_h, \psi_h]$, $S[f, h]$ są spełnione, to dla każdego $h \in H$ istnieje jedyne rozwiązanie $v \in \mathfrak{F}(\Omega_h, \mathbb{R})$ schematu różnicowo-funkcyjnego (127) i prawdziwe jest oszacowanie*

$$\|v\|_{\Omega_{h,\mu}} \leq \bar{\omega}(t^{(\mu)}) \leq \bar{\omega}(T), \quad \mu = 0, \dots, K_0, \quad (135)$$

gdzie $\bar{\omega}$ jest maksymalnym rozwiązaniem problemu (132).

Założenie $\hat{\mathbf{F}}[f, u]$

($\hat{F}_1$) $F[f, a, b, \varphi, \varphi_h, \psi_h]$ jest spełnione. Ponadto istnieją funkcje $\sigma_1 : [0, T] \times \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}_+$, $\rho : \mathbb{R}_+^2 \rightarrow \mathbb{R}_+$ o własnościach:

- (1) σ_1 jest ciągła i niemalejąca względem obu zmiennych, $\sigma_1(t, 0) = 0$ dla $t \in [0, T]$;
- (2) ρ_1 jest niemalejąca względem obu zmiennych;
- (3) dla każdego $c \geq 0$, $\varepsilon, \varepsilon_0 \geq 0$ maksymalne rozwiązanie problemu Cauchy'ego

$$\omega'(t) = c\sigma_1(t, D_1\omega(t)) + \varepsilon, \quad \omega(0) = \varepsilon_0 \quad (136)$$

jest określone na $[0, T]$ i funkcja $\tilde{\omega}_1(t) = 0$, $t \in [0, T]$ jest maksymalnym rozwiązaniem (136) dla $c \geq 0$, $\varepsilon, \varepsilon_0 = 0$, gdzie D_1 występuje w definicji operatora interpolacyjnego G_h ;

- (4) spełniony jest uogólniony warunek Perrona

$$|f(t, x, z, p, q) - f(t, x, \bar{z}, p, q)| \leq \rho_1(\|p\|, \|q\|) \sigma_1(t, \|z - \bar{z}\|_{\Omega_t}) \quad (137)$$

dla każdego $(t, x, z, p, q), (t, x, \bar{z}, p, q) \in \Delta_f^*$.

($\hat{F}_2$) $u \in C(\Omega, \mathbb{R}) \cap C^{1,2}(\bar{E}, \mathbb{R})$ jest rozwiązaniem problemu różniczkowo-funkcyjnego (124)–(126).

Twierdzenie 22 ([A5], tw. 5.1). *Przypuśćmy, że spełnione są założenia $F[f, a, b, \varphi, \varphi_h, \psi_h]$, $S[f, h]$, $\hat{F}[f, u]$, zachodzi (130), istnieją stałe $\tilde{a} > 0$, $\tilde{b} \geq 0$ takie, że $a(t, x) \geq \tilde{a}$, $b(t, x) \leq \tilde{b}$, $(t, x) \in \partial E_h$ i istnieją funkcje $\gamma_0, \gamma_1 : H \rightarrow \mathbb{R}_+$ takie, że*

$$|\varphi^{(\mu, m)} - \varphi_h^{(\mu, m)}| \leq \gamma_0(h), \quad (t^{(\mu)}, x^{(m)}) \in E_{0,h}, \quad \lim_{h \rightarrow 0} \gamma_0(h) = 0, \quad (138)$$

$$|\psi^{(\mu, m)} - \psi_h^{(\mu, m)}| \leq h_0 \gamma_1(h), \quad (t^{(\mu)}, x^{(m)}) \in \partial_0 E_h, \quad \lim_{h \rightarrow 0} \gamma_1(h) = 0. \quad (139)$$

Wówczas:

- (i) dla każdego $h \in H$ istnieje jedyne rozwiązanie $v \in \mathfrak{F}(\Omega_h, R)$ schematu różnicowo-funkcyjnego (127),
- (ii) istnieje funkcja $\alpha : H \rightarrow \mathbb{R}_+$ taka, że

$$\|U - v\|_{\Omega_{h,\mu}} \leq \alpha(h), \quad 0 \leq \mu \leq K_0, \quad \lim_{h \rightarrow 0} \alpha(h) = 0, \quad (140)$$

gdzie $U := u|_{\Omega_h}$, tzn. że metoda różnicowa jest jednostajnie zbieżna.

Twierdzenie 20 wynika z nierówności różniczkowych zwyczajnych, zaś twierdzenia 21, 22 udowodniłem przy pomocy twierdzeń 3.1, 3.2. Z kolei twierdzenia pomocnicze 3.1, 3.2 wykazałem, korzystając z twierdzenia Banacha o punkcie stałym i z indukcji matematycznej. Technikę porównawczą z dowodu twierdzenia 22 wykorzystałem do uzasadnienia twierdzenia 6 w rozdziale 2 tej rozprawy. Zwracam jeszcze uwagę, że zbiór $B(\Omega, \mathbb{R})$ w definicji dziedziny Δ_f funkcji f zastąpiłem zbiorem $C(\Omega, \mathbb{R})$ i rozważyłem tylko funkcje f różniczkowalne względem p, q , ze względu na zastosowania i aproksymację równania (124). Do takiego wniosku doszedłem już po publikacji pracy [A1], kiedy zacząłem bardziej dogłębnie zajmować się zagadnieniami dyfuzji.

6 Pozostałe osiągnięcia naukowo-badawcze

6.1 Wykaz publikacji

6.1.1 Publikacje przed doktoratem

- [B1] | L. Sapa, *A finite-difference method for a parabolic-elliptic system*, Opuscula Mathematica 17 (1997), 57–66.
- [B2] | L. Sapa, *A finite-difference method for a non-linear parabolic-elliptic system with Dirichlet conditions*, Universitatis Iagellonicae Acta Mathematica 37 (1999), 363–376.
- [B3] | J. Artymiuk, E. Artymiuk, L. Sapa, *Obliczenia konstrukcyjne przy projektowaniu gryzowych narzędzi wiertniczych*, Wiertnictwo, Nafta, Gaz 19 (2002), 27–34.

6.1.2 Publikacje po doktoracie

- [B4] | L. Sapa, *Existence and uniqueness of a classical solution of Fourier's first problem for nonlinear parabolic-elliptic systems*, Universitatis Iagellonicae Acta Mathematica 44 (2006), 83–95.
- [B5] | M. Malec, L. Sapa, *A finite difference method for nonlinear parabolic-elliptic systems of second-order partial differential equations*, Opuscula Mathematica 27 (2007), 259–289.
- [B6] | L. Sapa, *A finite difference method for quasi-linear and nonlinear differential functional parabolic equations with Neumann's condition*, Commentationes Mathematicae 49 (2009), 83–106.
- [B7] | K. Kropielnicka, L. Sapa, *Estimate of solutions for differential and difference functional equations with applications to difference methods*, Applied Mathematics and Computation 217 (2011), 6206–6218.
- [B8] | L. Sapa, *Estimates of solutions for parabolic differential and difference functional equations and applications*, Opuscula Mathematica 32 (2012), 529–549.
- [B9] | L. Sapa, *Implicit difference methods for differential functional parabolic equations with Dirichlet's condition*, Zeitschrift fur Analysis und ihre Anwendungen 32 (2013), 313–337.
- [B10] | K. Tkacz-Śmiech, B. Bożek, L. Sapa, M. Danielewski, *Viscosity controlled interdiffusion in nitriding*, Diffusion Foundations 10 (2016), 28–38.
- [B11] | M. Danielewski, L. Sapa, *Nonlinear Klein-Gordon equation in Cauchy-Navier elastic solid*, Cherkasy University Bulletin, Physical and Mathematical Sciences 1 (2017), 22–29.
- [B12] | L. Sapa, B. Bożek, M. Danielewski, *Weak solutions to interdiffusion models with Vegard rule*, AIP Conference Proceedings 1926, 020039 (2018), 020039-1–020039-9.
- [B13] | M. Danielewski, L. Sapa, *Foundations of the quaternion quantum mechanics*, Entropy 22, 1424 (2020), 1–20.
- [B14] | M. Danielewski, L. Sapa, *Diffusion in Cauchy elastic solid*, Diffusion Fundamentals 33 (2020), 1–14.
- [B15] | M. Danielewski, L. Sapa, *Quaternions and Cauchy classical theory of elasticity*, Advances in Manufacturing Science and Technology 44 (2020), 67–70.

[B16] B. Bożek, L. Sapa, K. Tkacz-Śmiech, M. Zajusz, M. Danielewski, *Compendium about multicomponent interdiffusion in two dimensions*, Metallurgical and Materials Transactions A (2021), doi 10.1007/s11661-021-06267-9.

6.2 Opis otrzymanych wyników

6.2.1 Dyfuzyjny i bezdyfuzyjny transport masy, [B10], [B11], [B12], [B13], [B14], [B15] [B16]

Artykuły B[12], B[16] są silnie związane z moimi badaniami dotyczącymi dyfuzyjnego transportu masy w ciałach stałych, których wyniki przedstawiłem w rozdziale 2 tej rozprawy. Praca [B12] jest materiałem konferencyjnym. Przedstawiliśmy tutaj modele matematyczne dyfuzji wzajemnej w ciałach stałych w przypadku jedno- i wielowymiarowym, odpowiednio (20)-(22) i (41)-(43). Ponadto sformułowaliśmy twierdzenia 1, 2, 3, które są udowodnione w [A6]. W [A7], [A8] opracowaliśmy niejawne metody różnicowe zachowujące regułę Vegarda dla problemu paraboliczno-eliptycznego (41)-(43) i udowodniliśmy niektóre ich własności w wymiarach 1D i 2D. Głównym walorem pracy [B16] jest opis eksperymentu laboratoryjnego dyfuzji w próbce złożonej z kobaltu, żelaza i niklu, w geometrii 2D i porównanie otrzymanych wyników z obliczeniami numerycznymi uzyskanymi przy pomocy metody różnicowej z [A8] dla modelu (41)-(43). Przeprowadzona analiza potwierdza poprawność modelu matematycznego, metody różnicowej i wyników teoretycznych z [A8], a więc w szczególności słuszność przyjętego postulatu (15) o potencjalności prędkości dryftu v^D . Praca ta jest na chwilę obecną ważnym kompendium na temat dyfuzji wzajemnej w ciałach stałych w wysokich temperaturach. Artykuł [B10] dotyczy szczególnej formy dyfuzji wzajemnej w ciałach stałych, jaką jest azotowanie metali i stopów w niskich temperaturach. W tym przypadku oprócz stężeń i dryftu należy uwzględnić jeszcze potencjały chemiczne i ciśnienie. Do konstrukcji modelu matematycznego wykorzystaliśmy dwa równania ciągłości, regułę Vegarda, lepkosprężyste równanie Maxwella na dryft i ciśnienie oraz równanie Gibbsa-Duhema na potencjały chemiczne. W przypadku jednowymiarowym opracowaliśmy niejawną metodę różnicową i wykonaliśmy serię eksperymentów numerycznych dla warunku brzegowego Robina z ruchomym jednym końcem przedziału określoności (problem Stefana).

Na drugim biegunie procesów transportu są zagadnienia całkowicie bezdyfuzyjnego przenoszenia masy w ośrodku idealnie sprężystym. Podstawy teoretyczne tego zagadnienia stworzył Cauchy, a później wykorzystał je Navier. W artykule [B13] wykazaliśmy, że kwaternionowa mechanika kwantowa ma dobrze ugruntowane korzenie matematyczne i może być wyprowadzona z modelu ośrodka sprężystego, tj. można uznać, że reprezentuje fizyczną rzeczywistość ośrodka sprężystego. Wychodząc od klasycznego równania równowagi Naviera-Cauchy’ego

$$u_{tt} = 3c^2 \nabla(\operatorname{div} u) - c^2 \operatorname{rot}(\operatorname{rot} u) \quad (141)$$

i wzoru na energię

$$e = \frac{1}{2} u_t \circ u_t + \frac{3}{2} c^2 (\operatorname{div} u)^2 + \frac{1}{2} c^2 \operatorname{rot} u \circ \operatorname{rot} u \quad (142)$$

oraz korzystając z twierdzenia Helmholtza o dekompozycji pola prędkości $u \in \mathbb{R}^3$ i algebry kwaternionów [37], wyprowadziliśmy układ kwaternionowych równań falowych Kleina-Gordona i Poissona, a także kwaternionowe równanie Schrödingera, stacjonarne i niestacjonarne. Kwaternionowe stacjonarne równanie Schrödingera uzyskaliśmy przy użyciu rachunku wariacyjnego, minimalizując odpowiedni rzeczywisty funkcjonal całkowity z lagranżjanu generowanego przez kwaternionowy operator różniczkowy Cauchy’ego-Riemanna. Praca [B13] rozszerza wyniki z [B11], [B14] i [B15]. W [B11] wyprowadziliśmy układ kwaternionowych równań falowych Kleina-Gordona i Poissona w trochę uboższej wersji dla idealnie sprężystego ośrodka, jakim jest

kryształ Plancka-Kleinerta. Uzyskaliśmy też nielocalne warunki brzegowe przy pomocy równania ciągłości dla kwaternionowego dyfuzyjnego strumienia energii. Z kolei w [B14] otrzymaliśmy kwaternionowe równanie Schrödingera dla kryształu Plancka-Kleinerta. Praca [B15] to krótki przegląd opisanych wyżej wyników dotyczących kwaternionowej teorii pola.

6.2.2 Metody różnicowe, [B1], [B2], [B5], [B6], [B7], [B8], [B9]

Prace [B1], [B2] i [B5] dotyczą konstrukcji oraz własności niejawnych metod różnicowych dla wielowymiarowych nieliniowych słabosprężonych różniczkowych układów paraboliczno-eliptycznych z warunkiem początkowym i różnymi warunkami brzegowymi. Artykuły [B1], [B2] napisałem przed doktoratem. Artykuł [B5] to skrót mojej pracy doktorskiej, która była uzupełniona jeszcze jednym rozdziałem opisanym poniżej w [B4]. Scharakteryzuję teraz krótko [B2], [B5]. W tych pracach badałem układy paraboliczno-eliptyczne w ogólnej postaci

$$\begin{cases} \partial_t z_l(t, x) = f_l(t, x, z(t, x), \partial_x z_l(t, x), \partial_{xx} z_l(t, x)), & (t, x) \in E, \quad l = 1, \dots, q, \\ f_l(t, x, z(t, x), \partial_x z_l(t, x), \partial_{xx} z_l(t, x)) = 0, & (t, x) \in E, \quad l = q + 1, \dots, p, \end{cases} \quad (143)$$

gdzie funkcje $f_l : E \times \mathbb{R}^p \times \mathbb{R}^n \times M_{n \times n} \rightarrow \mathbb{R}$, $l = 1, \dots, p$ są zadane, $z = (z_1, \dots, z_p)$, $E = [0, T] \times (0, \delta)^n \subset \mathbb{R}^{1+n}$. Układ (143) rozważałem z warunkiem początkowym i warunkiem brzegowym, przy czym w [B2] jest to warunek Dirichleta, a w [B5] - ogólny nieliniowy sprzężony warunek

$$\begin{cases} \varphi_l(t, x, \tilde{z}(t, x), \partial_{x_i} z_l(t, x)) = 0, & (t, x) \in \partial_0 E, \quad l = 1, \dots, q, \\ \psi_l(t, x, z(t, x), \partial_{x_i} z_l(t, x)) = 0, & (t, x) \in \partial_0 E, \quad l = q + 1, \dots, p, \end{cases} \quad (144)$$

gdzie funkcje $\varphi_l : \partial_0 E \times \mathbb{R}^q \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, $l = 1, \dots, q$ oraz $\psi_l : \partial_0 E \times \mathbb{R}^p \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, $l = q + 1, \dots, p$ są zadane, $\tilde{z} = (z_1, \dots, z_q)$, $E = [0, T] \times \partial(0, \delta)^n$. W [B2] udowodniłem przy pomocy lematów 4.1, 5.2 o nierównościach dyskretnych i lematu 5.1 o zgodności metody różnicowej, twierdzenie 6.1 o oszacowaniu błędu i jednostajnej zbieżności. Z kolei w [B5] korzystając z lematów 5.1, 5.2, wykazałem twierdzenie 5.1 o istnieniu i jednoznaczności rozwiązania schematu różnicowego. Ważny lemat 5.2 uzasadniłem, korzystając z twierdzenia Banacha o punkcie stałym. Ponadto udowodniłem twierdzenie 5.3 o oszacowaniu błędu i jednostajnej zbieżności metody różnicowej. W dowodzie skorzystałem z lematów 5.3, 5.4, 5.5 o nierównościach dyskretnych oraz twierdzenia 5.2 o zgodności metody. Warto zwrócić uwagę, że aby uzasadnić twierdzenie 5.3, skorzystałem z nierówności dyskretnych z członami nielokalnymi, mimo że równania różniczkowe członów nielokalnych nie mają. Założenie regularnościowe odnośnie funkcji $f_l = f_l(t, x, z, p, q)$, $\varphi_l = \varphi_l(t, x, z, p)$ i $\psi_l = \psi_l(t, x, z, p)$ generujących równania (143) i warunki brzegowe (144) orzeka, że są one lipschitzowskie względem z, p, q w swoich dziedzinach.

Prace [B6], [B7], [B8] i [B9] poświęcone są konstrukcji oraz badaniu własności jawnych i niejawnych metod różnicowych dla wielowymiarowych nieliniowych i quasi-liniowych nielokalnych równań parabolicznych z warunkiem początkowym i warunkami brzegowymi Dirichleta lub Neumanna. Rozważamy równania paraboliczne w sensie Waltera z zależnością funkcyjną typu Volterry postaci

$$\partial_t z(t, x) = f(t, x, z, \partial_x z(t, x), \partial_{xx} z(t, x)), \quad (t, x) \in E, \quad (145)$$

gdzie funkcja $f : E \times B(\Omega, \mathbb{R}) \times \mathbb{R}^n \times M_{n \times n} \rightarrow \mathbb{R}$ jest zadana. Przy czym w pracach [B8], [B9] zbiór $B(\Omega, \mathbb{R})$ został zastąpiony zbiorem $C(\Omega, \mathbb{R})$ (patrz rozdział 5). Artykuł [B6] jest odpowiedzią na pracę [A1] z tą różnicą, że tutaj warunek brzegowy jest typu Neumanna. Założenia, twierdzenia i technika dowodowa są analogiczne jak w [A1], ale realizacja tego była możliwa dzięki sformułowaniu i dowodowi dyskretnego twierdzenia porównawczego 3.1. Artykuł [B7], podobnie jak [A1], dotyczy zbieżności i stabilności jawnych metod różnicowych dla równań

z warunkiem Dirichleta. Zapoczątkował on ważną ideę znajdowania oszacowań rozwiązań różniczkowych i dyskretnych, niezależnie od kroków siatki, co pozwoliła na istotne osłabienie założenia warunku Perrona, tzn. zakładamy go na zbiorze Δ_f^* zamiast na zbiorze Δ_f - opisałem to dokładnie w rozdziale 5, analizując pracę [A5]. Pomysł ten wykorzystałem później w pracy [B8], a w [A5] poszedłem jeszcze dalej i założenia na kroki siatki również przyjąłem tylko na Δ_f^* . Prace [B8], [B9] poświęcone są metodom różnicowym niejawnym dla równań z warunkiem Dirichleta. Dowodzi się w nich analogiczne twierdzenia jak w wyżej opisanych artykułach, czyli o istnieniu i jednoznaczności rozwiązań schematów różnicowych oraz o zbieżności i stabilności. Ale było to możliwe dzięki sformułowaniu i dowodowi w [B9] twierdzenia 3.1 o istnieniu i jednoznaczności rozwiązań niejawnego dyskretnego równania funkcyjnego z warunkiem początkowo-brzegowym oraz dyskretnego twierdzenia porównawczego 3.2. Jak już wspominałem wcześniej, w [B8] wprowadziłem najbardziej ogólny warunek Perrona (137).

6.2.3 Inne prace, [B3], [B4]

Artykuł [B3] powstał przed moim doktoratem i ma charakter czysto aplikacyjny. Przy pomocy elementarnych obliczeń matematycznych scharakteryzowaliśmy pewne konstrukcyjne zależności przy projektowaniu gryzowych narzędzi wiertniczych.

Artykuł [B4] napisany jest na podstawie jednego rozdziału w mojej pracy doktorskiej. Udowodniłem w nim twierdzenie 1, o istnieniu i jednoznaczności globalnego w czasie klasycznego rozwiązania jednowymiarowego słabo sprzężonego nieliniowego nielokalnego układu paraboliczno-eliptycznego z warunkiem początkowym i warunkiem brzegowym Dirichleta. Twierdzenie to wykazałem przy pomocy metody monotonicznej dolnych i górnych rozwiązań z wykorzystaniem własności funkcji Greena dla operatora Stourma-Liouville'a i odpowiedniego operatora Niemyckiego.

Literatura

- [1] U.G. Abdulla, *On the Dirichlet problem for reaction-diffusion equations in non-smooth domains*, Nonlinear Anal. 47 (2001), 765–776.
- [2] A.A. Adams, J.J.F. Fournier, *Sobolev Spaces*, Elsevier, Amsterdam 2008.
- [3] O. Arino, S. Gautier, J.P. Penot, *A fixed point theorem for sequentially continuous mappings with application to ordinary differential equations*, Funkcial. Ekvac. 27 (1984), 273–279.
- [4] V. Barcion, D.P. Chen, R.S. Eisenberg, J.W. Jerome, *Qualitative properties of steady-state Poisson–Nernst–Planck systems: perturbation and simulation study*, SIAM J. Appl. Math. 57 (1997), no. 3, 631–648.
- [5] P. Biler, *Existence and asymptotics of solutions for a parabolic-elliptic system with nonlinear no-flux boundary conditions*, Nonlinear Anal.-Theor. 19 (1992), 1121–1136.
- [6] P. Biler, W. Hebisch, T. Nadzieja, *The Debye system: existence and large time behavior of solutions*, Nonlinear Anal.-Theor. 23 (1994), 1189–1209.
- [7] P. Biler, T. Nadzieja, *Existence and nonexistence of solutions for a model of gravitational interaction of particles, I*, Colloq. Math. 66 (1994), 319–334.

- [8] P. Biler, D. Hilhorst, T. Nadzieja, *Existence and nonexistence of solutions for a model of gravitational interaction of particles, II*, Colloq. Math. 67 (1994), 297–308.
- [9] P. Biler, *Existence and nonexistence of solutions for a model of gravitational interaction of particles, III*, Colloq. Math. 68 (1995), 229–239.
- [10] T.R. Brumleve, R.P. Buck, *Numerical solution of the Nernst–Planck and Poisson equation system with applications to membrane electrochemistry and solid state physics*, J. Electroanal. Chem. 90 (1978), 1–31.
- [11] S. Brzychczy, R.R. Poznanski, *Mathematical Neuroscience*, Elsevier, Amsterdam 2014.
- [12] S. Carl, V.K Le, D. Motreanu, *Nonsmooth variational problems and their inequalities, Comparison principles and applications*, Springer, New York 2007.
- [13] H.C. Chang, G. Jaffé, *Polarization in electrolytic solutions. Part I., Theory*, J. Chem. Phys. 20 (1952), 1071–1077.
- [14] M. Chipot, *Elements of Nonlinear Analysis*, Birkhäuser, Basel 2000.
- [15] R. Ciarski, *Numerical approximations of parabolic differential functional equations with the initial boundary conditions of the Neumann type*, Ann. Polon. Math. 84 (2004), 103–119.
- [16] R. Ciarski, *Stability of difference equations generated by parabolic differential functional equations*, Demonstratio Math. 38 (2005), 101–117.
- [17] E.A Coddington, N. Levinson, *Theory of Ordinary Differential Equations*, McGraw-Hill Book Company, New York 1955.
- [18] P. Constantin, M. Ignatova, *On the Nernst-Planck-Navier-Stokes system*, Arch. Ration. Mech. Anal. 232 (2019), no. 3, 1379–1428.
- [19] M. Danielewski, R. Filipek, K. Holly, B. Bożek, *Interdiffusion in multicomponent solid solutions. The mathematical model for thin films*, Phys. Stat. Sol. a 145 (1994), 339–350.
- [20] M. Danielewski, K. Holly, W. Krzyżański, *Interdiffusion in r -component ($r \geq 2$) one dimensional mixture showing constant concentration*, Comp. Methods Materials Science 8 (2008), 31–46.
- [21] L.S. Darken, *Diffusion, mobility and their interrelation through free energy in binary metallic systems*, Trans. AIME 175 (1948), 184–201.
- [22] D. Dautray, R.D Lions, *Mathematical Analysis and Numerical Methods for Science and Technology*, Springer, Berlin 1992.
- [23] P. Debye, E. Hückel, *De la theorie des electrolytes. I. abaissement du point de congelation et phenomenes associes*. Physikalische Zeitschrift, 1923.
- [24] C.R. Doering, J.D. Gibbon, *Applied Analysis of the Navier–Stokes Equations*, Cambridge University Press, New York 2004
- [25] B. Eisenberg, W. Liu, *Poisson-Nernst-Planck systems for ion channels with permanent charges*, SIAM J. Math. Anal. 38 (2007), 1932–1966.

- [26] B. Eisenberg, W. Liu, H. Xu, *Reversal permanent charge and reversal potential: Case studies via classical Poisson-Nernst-Planck models*, Nonlinearity 28 (2015), 103–128.
- [27] J. Evans, N. Fenichel, J. Feroe, *Double impulse solutions in nerve axon equations*, SIAM J. of Appl. Math. 42(2) (1982), 219–234.
- [28] L.C. Evans, *Partial Differential Equations*, AMS, Providence 1998.
- [29] A. Fick, *Ueber diffusion*, Pogg. Ann. 94 (1855), 59–86.
- [30] R. Filipek, *Modeling and Inverse Methods in Materials Engineering*, Wydawnictwo Naukowe Akapit, Kraków 2019.
- [31] R. FitzHugh, *Impulses and physiological states in theoretical models of nerve membrane*, Biophys. J. 1 (1961), 445–466.
- [32] R. FitzHugh, *Mathematical models of excitation and propagation in nerve*, H.P. Schwan (Ed.), Biological Engineering, McGraw-Hill Inc., New York 1969.
- [33] H. Gajewski, *On existence, uniqueness and asymptotic behavior of solutions of the basic equations for carrier transport in semiconductors*, Z. Angew. Math. Mech. 65 (1985), 101–108.
- [34] A. Gawlik, V.A. Vladimirov, S. Skurativskiy, *Existence of the solitary wave solutions supported by the modified FitzHugh-Nagumo system*, Nonlinear Anal-Model. 25 (2020), 482–501.
- [35] A. Gawlik, V.A. Vladimirov, S. Skurativskiy, *Solitary wave dynamics governed by the modified FitzHugh-Nagumo equation*, J. Computat. Nonlinear Dyn. 15 (2020), 1–6.
- [36] B.H. Gilding, R. Kersner, *Memorandum no. 1585, in: Faculty of Mathematical Sciences*, University of Twente, 2001.
- [37] K. Gürlebeck, W. Sprößig, *Quaternionic Analysis and Elliptic Boundary Value Problems*, Akademie-Verlag, Berlin 1989.
- [38] J. Henry, B. Louro, *Asymptotic analysis of reaction-diffusion-electromigration systems*, Research Report RR-2048 <inria-00074624> (1993).
- [39] A.L. Hodgkin, A.F. Huxley, *A quantitative description of membrane current and its application to conduction and excitation in nerve*, J. Physiol. 117 (1952), 500–544.
- [40] K. Holly, M. Danielewski, *Interdiffusion and free-boundary problem for r -component ($r \geq 2$) one-dimensional mixtures showing constant concentration*, Phys. Rev. B 50 (1994), 13336–13346.
- [41] C-Y. Hsieh, T-C. Lin, C. Liu, P. Liu, *Global existence of the non-isothermal Poisson-Nernst-Planck-Fourier system*, J. Differential Equations 269 (2020), no. 9, 7287–7310.
- [42] H.N.A. Ismail, A.A.A. Rabboh, *A restrictive Padé approximation for the solution of the generalized Fisher and Burger-Fisher equations*, Appl. Math. Comput. 154 (2004) 203–210.

- [43] J.W. Jerome, *Consistency of semiconductor modeling: an existence/stability analysis for the stationary van Roosbroeck system*, SIAM J. Appl. Math. 45 (1985), no. 4, 565–590.
- [44] S. Ji, W. Liu, *Poisson-Nernst-Planck systems for ion flow with density functional theory for hard-sphere potential: I-V relations and critical potentials. Part I: Analysis*, J. Dynam. Differential Equations 24 (2012), 955–983.
- [45] D.D. Joseph, L. Preziosi, *Heat Waves*, Rev. Mod. Phys. 61.41(1) (1989), 41–73.
- [46] Z. Kamont, H. Leszczyński, *Stability of difference equations generated by parabolic differential-functional problems*, Rend. Mat. Appl. (7) 16 (1996), 265–287.
- [47] Z. Kamont, *Hyperbolic Functional Differential Inequalities and Applications*, Kluwer Academic Publisher, Dordrecht, Boston, London 1999.
- [48] Z. Kamont, *Numerical approximations of difference functional equations and applications*, Opuscula Math. 25 (2005), 109–130.
- [49] Z. Kamont, *Implicit difference schemes for evolution functional differential equations*, Z. Anal. Anwend. 30 (2011), 105–128.
- [50] Z. Kamont, K. Kropielnicka, *Comparison of explicit and implicit difference schemes for parabolic functional differential equations*, Ann. Polon. Math. 103 (2012), 135–160.
- [51] M.S. Kilic, M. Z. Bazant, A. Ajdar, *Steric effects in the dynamics of electrolytes at large applied voltages. I. Double-layer charging*, J. Phys. Rev. E 75 (2007), 021502, 1–16.
- [52] M.S. Kilic, M.Z. Bazant, A. Ajdar, *Steric effects in the dynamics of electrolytes at large applied voltages. II. Modified Poisson–Nernst–Planck equations*, J. Phys. Rev. E 75 (2007), 021503, 1–11.
- [53] A. Klaasen, W. Troy, *The stability of traveling wave front solutions of a reaction-diffusion system*, SIAM Journal of Appl. Math. 41(1) (1981), 145–167.
- [54] O.A. Ladyzhenskaya, V.A. Solonnikov, N.N Ural’ceva, *Linear and quasilinear equations of parabolic type*, AMS, Providence 1988.
- [55] Ch.J. Larsen and R. Lui, *Uniqueness of steady-states and asymptotic behavior of solutions of a liquid junction model with insulation*, Nonlinear Anal. Real World Appl. 3 (2002), 227–241.
- [56] I. Lelidis, J.R. Macdonald, G. Barbero, *Poisson–Nernst–Planck model with Chang-Jaffé, diffusion, and ohmic boundary conditions*, J. Phys. D: Appl. Phys. 49 (2016), 025503.
- [57] B. Li, *Continuum electrostatics for ionic solutions with non-uniform ionic sizes*, Nonlinearity 22 (2009), 811–833.
- [58] W. Likus, V.A. Vladimirov, *Solitary waves in the model of active media, taking into account effects of relaxation*, Rep. Math. Phys. 75(2) (2015), 213–230.
- [59] H. Liu, Z. Wang, *A free energy satisfying finite difference method for Poisson–Nernst–Planck equations*, J. Comput. Phys. 268 (2014), 363–376.

- [60] W. Liu, *Geometric singular perturbation approach to steady-state Poisson-Nernst-Planck systems*, SIAM J. Appl. Math. 65 (2005), 754–766.
- [61] W. Liu, *One-dimensional steady-state Poisson-Nernst-Planck systems for ion channels with multiple ion species*, J. Differential Equations 246 (2009), 428–451.
- [62] W. Liu, B. Wang, *Poisson-Nernst-Planck systems for narrow tubular-like membrane channels*, J. Dynam. Differential Equations 22 (2010), 413–437.
- [63] J.R. Macdonald, *Effects of various boundary conditions on the response of Poisson-Nernst-Planck impedance spectroscopy analysis models and comparison with a continuous-time random-walk model*, J. Phys. Chem. A. 115 (2011) 13370–13380.
- [64] M. Malec, *Sur une méthode des différences finies pour une équation non linéaire différentielle fonctionnelle aux dérivées mixtes*, Ann. Polon. Math., 36 (1979), 1–10.
- [65] M. Malec, Cz. Mączka, W. Voigt, *Weak difference-functional inequalities and their application to the difference analogue of non-linear parabolic differential-functional equations*, Numer. Math. 11 (1983), 69–79.
- [66] M. Malec, M. Rosati, *A convergent scheme for non-linear systems of differential functional equations of parabolic type*, Rend. Mat. Appl. 3 (7) (1983), 211–227.
- [67] L. Malinowski, *Przewodzenie ciepła. Model hiperboliczny i relaksacyjny*, Wydawnictwo Uczelniane Zachodniopomorskiego Uniwersytetu Technologicznego, Szczecin 2009.
- [68] H.P. McKean, *Nagumo's equation*, Adv. Math. 4 (1971), 209–223.
- [69] J.D. Murray, *Mathematical Biology*, Springer, Berlin 1993.
- [70] J. Nagumo, S. Arimoto, S. Yoshizawa, *An active pulse transmission line simulating nerve axon*, Proceedings of the IRE 50 (1962), 2061–2070.
- [71] W. Nernst, *Die elektromotorische wirksamkeit der jonen*, Z. Phys. Chem. 4 (1889), 129–181.
- [72] M. Netka, *Implicit difference schemes for mixed problems related to parabolic functional differential equations*, Ann. Polon. Math. 100 (2011) 237–259.
- [73] C.V. Pao, *Finite difference reaction-diffusion systems with coupled boundary conditions and time delays*, J. Math. Anal. Appl. 272 (2002), 407–434.
- [74] M. Planck, *Ueber die erregung von electricität und wärme in electrolyten*, Ann. Phys. Chem. 39 (1890), 161–186.
- [75] T. Roubíček, *Nonlinear Partial Differential Equations with Applications*, Birkhäuser, Basel 2005.
- [76] A. Singer, D. Gillespie, J. Norbury, R. S. Eisenberg, *Singular perturbation analysis of the steady-state Poisson-Nernst-Planck system: Applications to ion channels*, European J. Appl. Math. 19 (2008), 541–560.

- [77] A.D. Smigelskas, E.O. Kirkendall, *Zinc diffusion in alpha brass*, Trans. AIME 171 (1947), 130–142.
- [78] T. Sokalski, P. Lingenfelter, A. Lewenstam, *Numerical solution of the coupled Nernst-Planck and Poisson equations for liquid junction and ion selective membrane potentials*, J. Phys. Chem. B 107 (2003), 2243–2251.
- [79] M. Tagliazucchi, I. Szleifer, *Transport mechanism in nanopores and nanochannels: can we mimic nature?*, Mater. Today 18 (2015), 131–142.
- [80] K. Tkacz-Śmiech, *Multicomponent Diffusion*, Wydawnictwo Naukowe Akapit, Kraków 2018.
- [81] I. Valent, P. Petrovič, P. Neogrády, I. Schraiber, M. Marek, *Electrodiffusion kinetics of ionic transport in a simple membrane channel*, J. Phys. Chem. B 117 (2013), 14283–14293.
- [82] A. Denton, N. Ashcroft, *Vegard’s law*, Phys. Rev. A 43 (1991), 3161–3164.
- [83] V.M. Volgin, V.V. Lyubimov, I.V. Gnidina, T.B. Kabanova, A.D. Davydov, *Simulation of ionic transport in concentrated solutions using bi-velocity method*, J. Electroanal. Chem. 824 (2018), 181–187.
- [84] V. Volpert, *Elliptic Partial Differential Equations, Vol. 2: Reaction-Diffusion Equations*, Springer, Basel 2014.
- [85] Y. Wang, C. Liu, Z. Tan, *A generalized Poisson-Nernst-Planck-Navier-Stokes model on the fluid with the crowded charged particles: derivation and its well-posedness*, SIAM J. Math. Anal. 48 (2016), no. 5, 3191–3235.
- [86] W. Walter, *Differential and Integral Inequalities, Monograph*, Springer, Berlin, Heidelberg, New York 1970 .
- [87] M.J. Ward, L.G. Reyna, F.M. Odeh, *Multiple steady-state solutions in a multijunction semiconductor device*, SIAM J. Appl. Math. 51 (1991), no. 1, 90–123.
- [88] B. Wierzbna, W. Skibinski, *The intrinsic diffusivities in multicomponent systems*, Phys. A 440 (2015), 100–109.
- [89] J. Wu, *Theory and Applications of Partial Functional Differential Equations*, Springer, New York 1996.
- [90] E. Zeidler, *Nonlinear Functional Analysis and its Applications II/A: Linear Monotone Operators*, Springer, New York 1990.

5. Aktywność naukowa w więcej niż jednej uczelni lub instytucji naukowej:

- Współpracuję z matematykami z Uniwersytetu Jagiellońskiego (dr hab. P. Kalita). Zaowocowało to ważnym artykułem [A4].
- Współpracuję z matematykami z Uniwersytetu Gdańskiego (dr. hab. K. Kropielnicka, prof. H. Leszczyński, wcześniej prof. Z. Kamont). Zaowocowało to ważnym artykułem [B7]. Wygłosiłem kilka referatów na seminarium prowadzonym przez H. Leszczyńskiego, wcześniej przez Z. Kamonta.

- Od wielu lat uczestniczę w seminarium Równania różniczkowe cząstkowe, prowadzonym przez prof. P. Zgliczyńskiego i dr hab. A. Ochal na Uniwersytecie Jagiellońskim. Wygłosiłem tam wiele referatów, w szczególności: 8 marca 2011, Metody różnicowe dla równań parabolicznych; 28 stycznia 2014, Istnienie i jednoznaczność rozwiązania układu ewolucyjnego z warunkiem początkowym oraz problem stabilności rozwiązań stacjonarnych i falowych; 26 maja 2014, Badanie stabilności orbitalnej metodą skończenie wymiarowej redukcji zagadnienia własnego; 15 i 26 marca 2016, Dyfuzja wieloskładnikowa; 21, 28 marca 2017, Różniczkowe nierówności rekurencyjne i oszacowania dla układu Naviera-Stokesa; 9 maja 2018, Matematyczna, numeryczna i fizyczna analiza modeli dyfuzji wzajemnej w dryftem.
- Przez 1 rok uczestniczyłem w seminarium prowadzonym przez prof. F. Barańskiego na Politechnice Krakowskiej. Wygłosiłem tam kilka referatów. W 2018 roku przez 1 semestr uczestniczyłem w seminarium prowadzonym przez prof. J. Korońskiego na Politechnice Krakowskiej. Wygłosiłem tam referat.
- 19 czerwca 2020 wygłosiłem referat, Układy paraboliczno-eliptyczne w modelach dyfuzji, na seminarium Analiza nieliniowa, prowadzonym przez dr hab. M. Galewskiego i prof. W. Kryszewskiego na Politechnice Łódzkiej.
- 4 marca 2021 wygłosiłem referat, Układy paraboliczno-eliptyczne i paraboliczne w modelach dyfuzji, na seminarium Równania fizyki matematycznej, prowadzonym przez prof. G. Łukaszewicza na Uniwersytecie Warszawskim. Uczestniczę w tym seminarium, które jest prowadzone online.
- Od 10 lat współpracuję z naukowcami z Wydziału Inżynierii Materiałowej i Ceramiki AGH (prof. M. Danielewski, prof. R. Filipek, prof. K. Tkacz-Śmiech, dr. K. Szyszkiewicz-Warzecha, dr. M. Zajusz). Zaowocowało to wieloma artykułami: [A4], [A6], [A7], [A8], [B10]-[B16]. Byłem wykonawcą w 3 grantach, 2 kierowanych przez prof. M. Danielewskiego (MAESTRO, nr 2011/02/A/ST8/00280; OPUS 13, nr 2017/25/B/ST8/02549) i 1 kierowanym przez prof. R. Filipka (INNOTECH-K1/IN1/25/153217/NCBR/12). Współpraca z praktykami daje mi możliwość weryfikacji konstruowanych modeli matematycznych opisujących dyfuzję w ciałach stałych, poprzez porównywanie twierdzeń matematycznych i symulacji numerycznych z wynikami eksperymentów laboratoryjnych. Efekty takiego porównania są szczególnie widoczne w pracach [A8] i [B16]. Sądzę, że w przyszłości analiza eksperymentów pomoże mi w dowodzie nowych twierdzeń matematycznych dotyczących własności rozwiązań równań różniczkowych generowanych przez wspomniane modele. Mam również nadzieję, że uda się przeprowadzić odpowiednie eksperymenty z kanałami jonowymi, biologicznymi lub ich sztucznymi odpowiednikami.

6. Osiągnięcia dydaktyczne, organizacyjne oraz popularyzujące naukę:

a) Działalność dydaktyczna:

- Byłem promotorem 18 obronionych prac magisterskich. Obecnie mam 3 magistrentki. Byłem również promotorem 11 obronionych prac licencjackich. Recenzowałem wiele prac magisterskich i licencjackich.
- Drugi rok prowadzę ważny wykład kursowy Równania różniczkowe, dla drugiego roku studiów I stopnia na Wydziale Matematyki Stosowanej. Od wielu lat prowadzę wykład monograficzny (obecnie konwersatorium) Metody numeryczne równań różniczkowych cząstkowych, dla studiów II stopnia na Wydziale Matematyki Stosowanej - jest on obowiązkowy dla specjalności matematyka obliczeniowa i komputerowa. Ponadto przez kilka lat prowadziłem na Wydziale

Matematyki Stosowanej wykład monograficzny, Metody iteracyjne dla równań nieliniowych oraz ćwiczenia z Analizy matematycznej i Analizy funkcjonalnej, a także przez jeden rok - seminarium licencjackie.

- Prowadziłem na AGH wykłady i ćwiczenia z matematyki dla kierunków: elektrotechnika, elektronika, informatyka, telekomunikacja, energetyka, technologia chemiczna. Od początku zatrudnienia w 1993 roku, prowadzę wykłady i ćwiczenia z matematyki na studiach niestacjonarnych, na kierunkach: elektrotechnika, informatyka. W latach 1993-2015 prowadziłem wykłady i ćwiczenia z matematyki i ze statystyki matematycznej w Zamiejscowych Ośrodkach Dydaktycznych AGH w Krośnie, Nowej Soli, Bolesławcu i Jastrzębiu Zdroju.
- W 2014 roku przyznano mi Medal Komisji Edukacji Narodowej.

b) Działalność organizacyjna:

- Przez 3 ostatnie kadencje byłem członkiem Rady Wydziału Matematyki Stosowanej AGH. W tym okresie byłem członkiem Wydziałowej Komisji Dydaktycznej oraz Komisji Dyscyplinarnej AGH ds. Studentów. Przez 2 kadencje byłem członkiem Wydziałowej Komisji ds. Nagród i Odznaczeń. Obecnie jestem członkiem Wydziałowej Komisji Dydaktycznej, Zespołu ds. Specjalności Matematyka w Naukach Technicznych i Przyrodniczych oraz Komisji Egzaminacyjnej do Przeprowadzenia Egzaminu Licencjackiego i Egzaminu Wstępnego na Studia II Stopnia.
- W latach 2008 i 2009 uczestniczyłem w pracach Wydziałowej Komisji Rekrutacyjnej.
- W ramach rekrutacji na AGH od wielu lat biorę udział w organizacji Olimpiady o Diamentowy Indeks AGH, przeprowadzając drugi etap tej olimpiady w Nowej Soli.
- Przez ostatnią kadencję byłem członkiem Komisji Rewizyjnej Oddziału Krakowskiego Polskiego Towarzystwa Matematycznego.

c) Działalność popularyzująca naukę:

- Od wielu lat biorę udział w organizacji Festiwalu Nauki w Krakowie.

7. Inne informacje:

- Według bazy Web of Science mój indeks Hirscha jest równy 5, w bazie tej jest 14 moich artykułów ([A9] i [B16] nie są jeszcze uwzględnione), liczba cytowań jest równa 51, w tym bez autocytowań 22; liczba artykułów cytujących jest równa 27, w tym bez autocytujących 17.
- Brałem udział w 30 konferencjach naukowych o zasięgu międzynarodowym, w tym 5 zagranicznych: 2 razy na Łotwie, 1 raz na Węgrzech, na Ukrainie i w Bułgarii. Wygłosiłem 26 referatów, w tym jeden plenarny (Łotwa, 2018) i zaprezentowałem 2 postery. Ponadto byłem współautorem 11 referatów na konferencjach naukowych o zasięgu międzynarodowym, w tym 8 zagranicznych: 4 razy w Austrii, 1 raz w Korei Południowej, Grecji, na Chorwacji i na Ukrainie.
- Byłem wykonawcą w 3 grantach:
 - 1) MAESTRO, nr 2011/02/A/ST8/00280, Uogólnienie opisu dyfuzji w ciałach stałych; unifikacja metody dyfuzji wzajemnej i termodynamiki procesów nieodwracalnych dla projektowania nowych materiałów, Kierownik: prof. M. Danielewski, Projekt realizowany w latach: 30.04.2012 - 30.04.2017,

- 2) INNOTECH-K1/IN1/25/153217/NCBR/12, Innowacyjna nieniszcząca metoda diagnostyki korozji konstrukcji żelbetowych, Kierownik: prof. R. Filipek. Projekt realizowany w latach: 1.05.2012 - 30.09.2015.
 - 3) OPUS 13, nr 2017/25/B/ST8/02549, Elektrolity stałe nowej generacji - wpływ domieszek na właściwości tlenkowych materiałów o wysokiej entropii, Kierownik: prof. M. Danielewski, Projekt realizowany w latach: 23.11.2017 - 23.11.2020, przedłużony do września 2021.
- Recenzowałem 19 artykułów naukowych do następujących czasopism: Mathematics (6), Journal of Computational and Applied Mathematics (2), Annales Polonici Mathematici (2), Opuscula Mathematica (2), Universitatis Iagellonicae Acta Mathematica (2), Mathematical Biosciences (2), Symmetry (1), Mathematical Bulletin of the Shevchenko Scientific Society (1), Machines (1).
 - W 2015 roku recenzowałem książkę prof. J. Myjaka, Równania różniczkowe, dla Wydawnictw AGH.
 - Za działalność naukową otrzymałem Nagrodę Rektora indywidualną III stopnia, w 2012 i 2019 roku.