

## ПРО ОДИН ПІДХІД ДО ЧИСЛОВОГО РОЗВ'ЯЗУВАННЯ ЗАДАЧ МАСОПЕРЕНЕСЕННЯ З ВЕЛИКИМИ ЧИСЛАМИ ПЕКЛЕ

*Розглянуто математичну модель поширення ліків у стінці судини. Модель описується крайовою задачею адвекції-дифузії для системи двох диференціальних рівнянь. У зв'язку зі специфікою вхідних параметрів задачі – коефіцієнт адвекції значно перевищує коефіцієнт дифузії – застосування до розв'язування задачі класичного методу скінченних елементів з лінійними та квадратичними базисними функціями призводить до втрати стійкості обчислювального процесу. У роботі запропоновано новий підхід до розв'язування задач адвекції-дифузії з великими числами Пекле, який базується на заміні шуканої функції експоненціальною у формулюванні задачі і зворотній заміні при застосуванні методу скінченних елементів. Проведено числовий аналіз результатів застосування запропонованого методу до наближеного розв'язання задачі поширення ліків у стінці судини.*

**Ключові слова:** рівняння адвекції-дифузії, метод скінченних елементів, втрата стійкості розв'язку, число Пекле.

У роботі досліджується крайова задача для системи двох диференціальних рівнянь, що описує процес поширення ліків у стінці судини при лікуванні атеросклерозу [5], з метою аналізу параметрів процесу лікування і їх оптимізації. Одним із актуальних способів лікування цього захворювання є використання катетера для доставки лікувального препарату – сукупності наночастинок, кожна з яких містить інкапсульовані біоактивні речовини (ліки) [7], у зону ураження. Після поглинання наночастинок тканиною стінок судин процес подальшого їхнього переносу відбувається в основному за рахунок адвекції-дифузії, при якому з наночастинок вивільняються інкапсульовані ліки, що забезпечує терапевтичний вплив на цільовій ділянці артерії.

**1. Постановка задачі.** Нехай  $\Omega$  – відкрита зв'язна обмежена множина в  $\mathbb{R}^2$  з ліпшицевою границею  $\Gamma$ . Необхідно знайти  $c_1, c_2$  – невідомі концентрації наночастинок і ліків, відповідно, які задовольняють головні рівняння змішаної моделі переміщення ліків

$$\begin{aligned} \nabla \cdot (\mathbf{V}c_1) - K_1 \Delta c_1 + \sigma_1 c_1 &= 0, \\ \nabla \cdot (\mathbf{V}c_2) - K_2 \Delta c_2 + \sigma_2 c_2 &= c_1 f, \end{aligned} \quad (1)$$

і граничні умови

$$\beta_i K_i \frac{\partial c_i}{\partial \nu} + \lambda_i c_i = \psi_i, \quad (x_1, x_2) \in \Gamma, \quad i = 1, 2. \quad (2)$$

У рівняннях (1), (2)  $\mathbf{V}$  – поле швидкостей у стінці артерії;  $K_1, K_2$  – коефіцієнти дифузії,  $\sigma_1, \sigma_2$  – сталі метаболізму наночастинок і ліків, відповідно;  $f$  – рівень розчинності ліків на кожному наночастинку.

Раніше [3] за допомогою числового експерименту було встановлено, що для реальних біологічних і хімічних числових параметрів задачі розв'язок, одержаний методом скінченних елементів з лінійними та квадратичними базисними функціями [6], є нестійким, що обумовлено значною перевагою коефіцієнтів адвекції (числами Пекле) порівняно з коефіцієнтами дифузії. У цій роботі пропонуємо новий підхід до пошуку апроксимації розв'язку такого роду задач.

\* yuliya.turchyn@lnu.edu.ua

Оскільки рівняння (1), (2) пов'язані між собою лише наявністю невідомої концентрації наночастинок  $c_1$  у правій частині другого рівняння системи (1), то пропонуємо кожне рівняння розв'язувати по чергово. З огляду на те, що оператор кожного окремо рівняння є спільним [4], то надалі запропонований підхід розглядатимемо для одного рівняння адвекції-дифузії.

**2. Експоненціальна заміна у МСЕ.** Нехай  $\Omega$  – відкрита зв'язна обмежена множина в  $\mathbb{R}^2$  з ліпшицевою границею  $\Gamma$ . Необхідно знайти таку невідому концентрацію  $c$ , яка задовольняє рівняння

$$-K \left( \frac{\partial^2 c}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial x_2^2} \right) + V_1 \frac{\partial c}{\partial x_1} + V_2 \frac{\partial c}{\partial x_2} + \sigma c = f, \quad (x_1, x_2) \in \Omega, \quad (3)$$

і граничну умову

$$\beta K \frac{\partial c}{\partial \nu} + \lambda c = \psi, \quad (x_1, x_2) \in \Gamma. \quad (4)$$

Застосувавши у рівностях (3), (4) заміну [1]

$$c = u \exp \left( \frac{V_1 x_1 + V_2 x_2}{2K} \right), \quad (5)$$

одержимо такі вирази для похідних:

$$\frac{\partial c}{\partial x_i} = \frac{\partial u}{\partial x_i} \exp \left( \frac{V_1 x_1 + V_2 x_2}{2K} \right) + \frac{V_i}{2K} u \exp \left( \frac{V_1 x_1 + V_2 x_2}{2K} \right),$$

$$\frac{\partial^2 c}{\partial x_i^2} = \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x_i^2} + \frac{V_i}{K} \frac{\partial u}{\partial x_i} + \frac{V_i^2}{4K^2} u \right) \exp \left( \frac{V_1 x_1 + V_2 x_2}{2K} \right),$$

$$\frac{\partial c}{\partial \nu} = \frac{\partial u}{\partial \nu} \exp \left( \frac{V_1 x_1 + V_2 x_2}{2K} \right) + \left( \frac{V_1}{2K} \ell_1 + \frac{V_2}{2K} \ell_2 \right) u \exp \left( \frac{V_1 x_1 + V_2 x_2}{2K} \right).$$

Таким чином, задача (3), (4) еквівалентна такій задачі:

$$-K \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial x_2^2} \right) + \left( \frac{V_1^2 + V_2^2}{4K} + \sigma \right) u = f \exp \left( -\frac{V_1 x_1 + V_2 x_2}{2K} \right), \quad (x_1, x_2) \in \Omega, \quad (6)$$

$$\beta K \frac{\partial u}{\partial \nu} + \left( \beta \left( \frac{V_1}{2} \ell_1 + \frac{V_2}{2} \ell_2 \right) + \lambda \right) u = \psi \exp \left( -\frac{V_1 x_1 + V_2 x_2}{2K} \right), \quad (x_1, x_2) \in \Gamma. \quad (7)$$

Наведемо варіаційне формулювання одержаної задачі. Для цього введемо деякий простір  $W = \{u \in W_2^{(1)}(\Omega)\}$ .

Помножимо рівняння (4) на довільну функцію  $w \in W$  та проінтегруємо в області  $\Omega$ . Одержимо

$$\begin{aligned} -K \int_{\Omega} \Delta u w \, d\Omega + \left( \frac{V_1^2 + V_2^2}{4K} + \sigma \right) \int_{\Omega} u w \, d\Omega = \\ = \int_{\Omega} f w \exp \left( -\frac{V_1 x_1 + V_2 x_2}{2K} \right) d\Omega. \end{aligned} \quad (8)$$

Після застосування формули Остроградського – Гріна до першого доданка рівняння (8) одержимо

$$\begin{aligned}
& K \int_{\Omega} \nabla u \nabla w \, d\Omega - K \int_{\Gamma} \frac{\partial u}{\partial \nu} w \, d\Gamma + \left( \frac{V_1^2 + V_2^2}{4K} + \sigma \right) \int_{\Omega} u w \, d\Omega = \\
& = \int_{\Omega} f w \exp\left(-\frac{V_1 x_1 + V_2 x_2}{2K}\right) d\Omega.
\end{aligned}$$

Згідно з процедурою методу скінченних елементів, наступним кроком має бути дискретизація задачі на основі поділу області  $\Omega$  на скінченні елементи та побудова апроксимації на основі лінійної комбінації базисних функцій. Однак, якщо для отриманого вище рівняння застосувати безпосередньо метод скінченних елементів, то вихідна система лінійних алгебраїчних рівнянь матиме різні порядки коефіцієнтів правої та лівої частин (з огляду на останній множник у правій частині варіаційного рівняння), тому її розв'язок може бути некоректним.

Саме тому пропонуємо зворотню заміну

$$u = c \exp\left(-\frac{V_1 x_1 + V_2 x_2}{2K}\right). \quad (9)$$

Тоді, оскільки

$$\frac{\partial u}{\partial x_i} = \frac{\partial c}{\partial x_i} \exp\left(-\frac{V_1 x_1 + V_2 x_2}{2K}\right) - \frac{V_i}{2K} c \exp\left(-\frac{V_1 x_1 + V_2 x_2}{2K}\right),$$

отримаємо

$$\begin{aligned}
K \int_{\Omega} \nabla u \nabla w \, d\Omega &= K \int_{\Omega} \nabla c \nabla w \exp\left(-\frac{V_1 x_1 + V_2 x_2}{2K}\right) d\Omega - \\
&- \frac{V_1}{2} \int_{\Omega} c \frac{\partial w}{\partial x_1} \exp\left(-\frac{V_1 x_1 + V_2 x_2}{2K}\right) d\Omega - \\
&- \frac{V_2}{2} \int_{\Omega} c \frac{\partial w}{\partial x_2} \exp\left(-\frac{V_1 x_1 + V_2 x_2}{2K}\right) d\Omega. \quad (10)
\end{aligned}$$

Відомою є формула

$$\int_{\Omega} \left( \frac{\partial \varphi}{\partial x_1} + \frac{\partial \psi}{\partial x_2} \right) d\Omega = \int_{\Gamma} (\varphi \ell_1 + \psi \ell_2) d\Gamma,$$

а отже, прийнявши

$$\varphi = uv, \quad \psi = 0$$

і навпаки, легко переконатись у тому, що

$$\int_{\Omega} v \frac{\partial u}{\partial x_i} d\Omega = - \int_{\Omega} u \frac{\partial v}{\partial x_i} d\Omega + \int_{\Gamma} uv \ell_i d\Gamma.$$

Таким чином, у виразі (10) до двох останніх доданків можна застосувати перетворення типу

$$\begin{aligned}
& - \frac{V_i}{2} \int_{\Omega} c \frac{\partial w}{\partial x_i} \exp\left(-\frac{V_1 x_1 + V_2 x_2}{2K}\right) d\Omega = \\
& = \frac{V_i}{2} \int_{\Omega} \frac{\partial c}{\partial x_i} w \exp\left(-\frac{V_1 x_1 + V_2 x_2}{2K}\right) d\Omega - \\
& - \int_{\Gamma} c w \ell_i \exp\left(-\frac{V_1 x_1 + V_2 x_2}{2K}\right) d\Gamma - \\
& - \frac{V_i^2}{4K} \int_{\Omega} c w \exp\left(-\frac{V_1 x_1 + V_2 x_2}{2K}\right) d\Omega. \quad (11)
\end{aligned}$$

З крайової умови (7) випливає, що

$$\begin{aligned} -K \int_{\Gamma} \frac{\partial u}{\partial \nu} w \, d\Gamma &= \int_{\Gamma} \left( \frac{V_1}{2} \ell_1 + \frac{V_2}{2} \ell_2 \right) u w \, d\Gamma + \int_{\Gamma} \lambda u w \, d\Gamma - \\ &- \int_{\Gamma} \psi \exp \left( -\frac{V_1 x_1 + V_2 x_2}{2K} \right) w \, d\Gamma. \end{aligned}$$

Далі, враховуючи зворотну заміну (9), отримаємо

$$\begin{aligned} -K \int_{\Gamma} \frac{\partial u}{\partial \nu} w \, d\Gamma &= \int_{\Gamma} \left( \frac{V_1}{2} \ell_1 + \frac{V_2}{2} \ell_2 \right) c w \exp \left( -\frac{V_1 x_1 + V_2 x_2}{2K} \right) d\Gamma + \\ &+ \int_{\Gamma} \lambda c \exp \left( -\frac{V_1 x_1 + V_2 x_2}{2K} \right) w \, d\Gamma - \\ &- \int_{\Gamma} \psi \exp \left( -\frac{V_1 x_1 + V_2 x_2}{2K} \right) w \, d\Gamma. \end{aligned} \quad (12)$$

Остаточно, об'єднавши вирази (10)–(12), одержуємо таке варіаційне формулювання задачі:

$$\begin{aligned} K \int_{\Omega} \nabla c \nabla w \exp \left( -\frac{V_1 x_1 + V_2 x_2}{2K} \right) d\Omega - \\ - \int_{\Omega} \frac{V}{2} \cdot \nabla c w \exp \left( -\frac{V_1 x_1 + V_2 x_2}{2K} \right) d\Omega + \\ + \int_{\Gamma} \lambda c w \exp \left( -\frac{V_1 x_1 + V_2 x_2}{2K} \right) d\Gamma + \\ + \sigma \int_{\Omega} c w \exp \left( -\frac{V_1 x_1 + V_2 x_2}{2K} \right) d\Omega = \\ = \int_{\Omega} f w \exp \left( -\frac{V_1 x_1 + V_2 x_2}{2K} \right) d\Omega + \\ + \int_{\Gamma} \psi w \exp \left( -\frac{V_1 x_1 + V_2 x_2}{2K} \right) d\Gamma. \end{aligned} \quad (13)$$

За стандартною процедурою методу скінченних елементів, після триангуляції області на скінченні елементи  $\Omega = \bigcup_{i=1}^N \Omega_i$  з граничними елементами

$\Gamma = \bigcup_{i=1}^M \Gamma_i$  на скінченному елементі  $\Omega_e$  з вершинами з номерами  $i, j, k$

шукаємо апроксимацію розв'язку за допомогою лінійного базису [2]:

$$\begin{aligned} \varphi_i^{(e)}(x_1^{(i)}, x_2^{(i)}) &= \frac{1}{\delta} (a_i + b_i x_1 + c_i x_2), \\ a_i &= x_1^{(j)} x_2^{(m)} - x_1^{(m)} x_2^{(j)}, \quad b_i = x_2^{(j)} - x_2^{(m)}, \quad c_i = x_1^{(m)} - x_1^{(j)}, \\ \delta &= 2S_{ijm}. \end{aligned}$$

Апроксимація має такий вигляд:

$$c_h = c_i^h \varphi_i^{(e)}(x_1, x_2) + c_j^h \varphi_j^{(e)}(x_1, x_2) + c_m^h \varphi_m^{(e)}(x_1, x_2).$$

Далі до задачі (13) застосовуємо стандартну процедуру методу скінченних елементів.

Варто зазначити, що, згідно зі специфікою запропонованого підходу, метод скінченних елементів остаточно призведе до розв'язування СЛАР з коефіцієнтами, що утворюватимуться як суми визначених інтегралів з підінтегральними функціями, в які входять експоненти. Відомо, що класичні квадратури для таких підінтегральних функцій на практиці дають велику похибку апроксимації. Тому пропонуємо для одновимірних задач такі інтеграли шукати аналітично, а для двовимірних та тривимірних задач застосовувати спеціальні квадратури, зокрема IOST-квадратури [8], що дають змогу одержувати наближені значення визначених інтегралів з високою точністю.

**3. Числові експерименти.** Для дослідження розв'язку задач адвекції–дифузії з використанням запропонованого у цій статті підходу було проведено декілька числових експериментів. Для цього було створено програмне забезпечення на мові високого рівня С# та застосовано оптимізовані чисельні методи розв'язування системи лінійних алгебраїчних рівнянь.

Розглянемо одновимірну крайову задачу

$$-K \frac{d^2 c}{dx^2} + V \frac{dc}{dx} + \sigma c = f, \quad x \in (0, b), \quad (14)$$

$$c(0) = 0, \quad c(b) = 0. \quad (15)$$

Точний розв'язок задачі (14), (15) є відомим:

$$c(x) = \frac{f}{\sigma} \left\{ \left( \frac{e^{\alpha_2 b} - 1}{e^{\alpha_1 b} - e^{\alpha_2 b}} \right) e^{\alpha_1 x} + \left( \frac{1 - e^{\alpha_1 b}}{e^{\alpha_1 b} - e^{\alpha_2 b}} \right) e^{\alpha_2 x} + 1 \right\}, \quad (16)$$

де

$$\alpha_{1,2} = \frac{-V \pm \sqrt{V^2 + 4K\sigma}}{-2K}.$$

Згідно з запропонованим підходом, варіаційне формулювання задачі має вигляд

$$\begin{aligned} & K \int_a^b \frac{\partial c}{\partial x} \frac{\partial w}{\partial x} \exp\left(-\frac{V}{2K} x\right) dx + \frac{1}{\beta} [\varphi - \lambda c(a)] \exp\left(-\frac{V}{2K} a\right) - \\ & - \frac{1}{\gamma} [\chi - \mu c(b)] \exp\left(-\frac{V}{2K} b\right) + \frac{V}{2} \int_a^b \frac{dc}{dx} w \exp\left(-\frac{V}{2K} x\right) dx + \\ & + \sigma \int_a^b c w \exp\left(-\frac{V}{2K} x\right) dx = \int_a^b f w \exp\left(-\frac{V}{2K} x\right) dx. \quad (17) \end{aligned}$$

Розділивши проміжок  $[0, b]$  на скінченні елементи за допомогою розбиття  $x_i = ih$ ,  $h = \frac{b}{n}$ , на кожному скінченному елементі  $[x_{i-1}, x_i]$  розв'язок апроксимуємо лінійними базисними функціями

$$c^h = c_{i-1} \varphi_{i-1} + c_i \varphi_i,$$

де

$$\varphi_{i-1} = -\frac{x - x_i}{h}, \quad \varphi_i = \frac{x - x_{i-1}}{h}.$$

Таким чином, одержуємо тридіагональну систему лінійних алгебраїчних рівнянь, що утворюється з таких матриць і стовпців на кожному скінченному елементі:

$$K_e = K \int_{x_{i-1}}^{x_i} \begin{bmatrix} (\varphi'_{i-1})^2 & \varphi'_{i-1}\varphi'_i \\ \varphi'_{i-1}\varphi'_i & (\varphi'_i)^2 \end{bmatrix} \exp\left(-\frac{V}{2K}x\right) dx,$$

$$P_e = \frac{V}{2} \int_{x_{i-1}}^{x_i} \begin{bmatrix} \varphi'_{i-1}\varphi_{i-1} & \varphi'_{i-1}\varphi_i \\ \varphi'_{i-1}\varphi_i & \varphi'_i\varphi_i \end{bmatrix} \exp\left(-\frac{V}{2K}x\right) dx,$$

$$M_e = \sigma \int_{x_{i-1}}^{x_i} \begin{bmatrix} (\varphi_{i-1})^2 & \varphi_{i-1}\varphi_i \\ \varphi_{i-1}\varphi_i & (\varphi_i)^2 \end{bmatrix} \exp\left(-\frac{V}{2K}x\right) dx,$$

$$Q_e = \int_{x_{i-1}}^{x_i} \frac{M_e}{\sigma} \begin{bmatrix} f(x_{i-1}) \\ f(x_i) \end{bmatrix} \exp\left(-\frac{V}{2K}x\right) dx.$$

У зв'язку зі специфікою запропонованого підходу – появою експоненти як множника підінтегральних функцій – при обчисленні інтегралів за допомогою відомих квадратур, щоб уникнути накопичення похибки, інтеграли обчислювали аналітично за формулою

$$\int (mx^2 + kx + c) \exp(px + r) dx = \frac{p(cp + k(px - 1)) + m(p^2x^2 - 2px + 2)}{p^3} e^{px+r} + C.$$

Як перший приклад числових розрахунків вибрали дослідження розв'язку одновимірної задачі (14), (15). Обчислення виконано для таких вхідних параметрів задачі:

$$K = 1.0, \quad \sigma = 1.0, \quad f = 1.0.$$

На рис. 1 зображено графіки наближеного розв'язку задачі (14), (15), одержаного з використанням запропонованого підходу на основі експоненціальної заміни, і точного розв'язку (16) цієї задачі для різних значень числа  $Pe = \frac{|V|}{K} h$ . Обчислення виконано для кількості вузлів розбиття  $n = 128$  і значень  $Pe = 100, 200, 300$ . Як бачимо, криві одержаного наближеного розв'язку збігаються з відповідними кривими точного розв'язку.

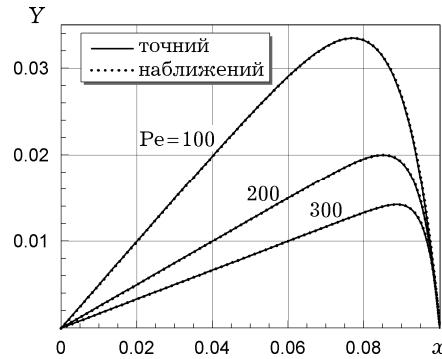


Рис. 1

При обчисленнях було виявлено, що при збільшенні числа Пекле до  $Pe \geq 450$  апроксимація втрачає такі хороші властивості збіжності. Однак цей недолік долається шляхом згущення сітки розбиття, причому збіжність досягається вже при незначному збільшенні кількості точок розбиття. Для значення  $Pe = 450$  на рис. 2 наведено графіки наближеного розв'язку задачі (14), (15) за запропонованою методикою при різних  $n$  (кривій 1 відповідає  $n = 128$ , кривій 2 –  $n = 256$ , кривій 3 –  $n = 512$ ) і точного розв'язку за формулою (16) – крива 4.

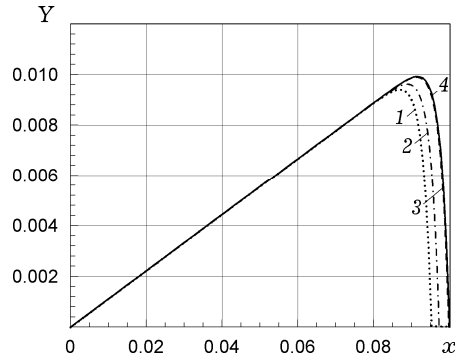


Рис. 2

Обчислено також значення відносних похибок наближеного розв'язку задачі (14), (15). При рівномірному розбитті відрізка  $[0, b]$  на  $n$  скінченних елементів відносну похибку методу обчислювали за такою формулою:

$$R_h = \max_i \frac{|u_{\text{exact}}(x[i]) - u^h(x[i])|}{u_{\text{exact}}(x[i])} \cdot 100\%.$$

У табл. 1 і табл. 2 наведено обчислені значення відносних похибок розв'язку задачі (у відсотках) при різних швидкостях адвекції  $V$  для різних значень кількості точок розбиття  $n$  і різних значень  $f$  – рівня розчинності ліків на кожну наночастинку.

Відносні похибки, наведені у табл. 1, обчислено при  $f = 1$ . Як бачимо, відносна похибка точного і наближеного розв'язку є зовсім незначною і зменшується зі збільшенням кількості точок розбиття. Варто також зазначити, що значення відносних похибок є стійкими при збільшенні числа  $n$ , що підкреслює ефективність цього методу. Проте стійкість втрачається зі збільшенням числа Пекле до  $Pe = 450$  і вище, але набувається зі збільшенням кількості точок розбиття до 1024 і вище.

Таблиця 1

| $V \backslash n$ | 100           | 200         | 300          | 450          |
|------------------|---------------|-------------|--------------|--------------|
| 4                | 0.009741119   | 0.025874049 | 0.055997279  | 0.0036132807 |
| 16               | 0.008988628   | 0.01932542  | 0.030551756  | 0.0005567496 |
| 64               | 0.008902722   | 0.018643844 | 0.02825550   | 0.0000824311 |
| 128              | 0.008898844   | 0.018613389 | 0.028154577  | 0.0000359896 |
| 512              | 0.008897657   | 0.018604070 | 0.0281237168 | 0.000006474  |
| 1024             | 0.00889759819 | 0.018603609 | 0.028122201  | 0.0009346509 |

У табл. 2 наведено значення відносних похибок для різних значень швидкостей адвекції  $V$  і різних значень  $f$ . Бачимо, що, як і в табл. 1, вони аналогічно є стійкими, і стійкість покращується зі згущенням сітки.

Таблиця 2

| $V \backslash f \backslash n$ | 10           | 100          | 200         | 300          | 450         |
|-------------------------------|--------------|--------------|-------------|--------------|-------------|
| $f \backslash n$              | 1            | 10           | 20          | 30           | 50          |
| 4                             | 0.000580462  | 0.009741119  | 0.025874049 | 0.055997279  | 0.180664032 |
| 16                            | 0.000579957  | 0.008988628  | 0.01932542  | 0.030551756  | 0.002783748 |
| 64                            | 0.000579897  | 0.008902722  | 0.018643844 | 0.02825550   | 0.000412155 |
| 128                           | 0.000579894  | 0.008898844  | 0.018613389 | 0.028154577  | 0.000181607 |
| 512                           | 0.000579894  | 0.008897657  | 0.018604070 | 0.0281237168 | 0.00003237  |
| 1024                          | 0.0005798936 | 0.0088975982 | 0.018603609 | 0.028122201  | 0.04673255  |

Як другий приклад числових розрахунків вибрали дослідження розв'язку задачі (1), (2) в одновимірному випадку. Обчислення виконано для таких параметрів задачі:

$$K_1 = 1.0, \quad K_2 = 1.0, \quad \sigma_1 = 1.0, \quad \sigma_2 = 1.0, \quad f = 600.0.$$

На рис. 3 зображено графіки для різних чисел Пекле одержаних апроксимацій невідомих наночастинок (крива 1 при  $Re_1 = 100$ , крива 3 при  $Re_2 = 50$ ) і ліків (крива 2 при  $Re_1 = 300$ , крива 4 при  $Re_2 = 50$ ).

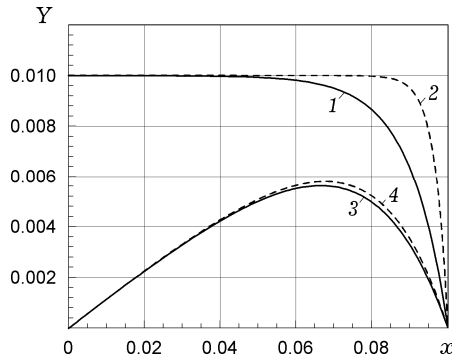


Рис. 3

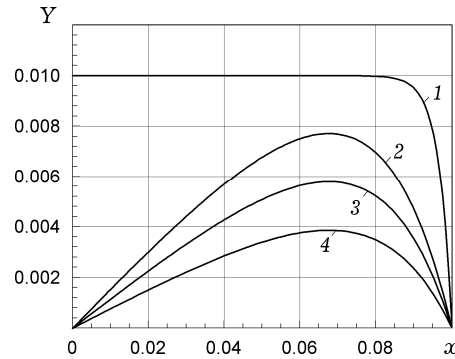


Рис. 4

На рис. 4 зображено графіки розв'язку задачі (1), (2) з такими ж вхідними параметрами, як у попередньому прикладі, але при різних рівнях розчинності біоактивних речовин  $c_2$  (крива 2 при  $f = 800$ , крива 3 при  $f = 600$ , крива 4 при  $f = 400$ ) на кожен наночастинок  $c_1$  (крива 1 при  $Re_1 = 300$ ). Як видно з графіків, при збільшенні рівня розчинності  $f$  концентрація ліків зростає, що відповідає фізичному змісту задачі.

**Висновки.** Таким чином, у роботі досліджено математичну модель поширення ліків у стінці судини. Оскільки попередньо було виявлено недозцільність використання стандартного підходу методу скінченних елементів до цієї задачі з огляду на специфіку реальних біохімічних параметрів задачі – значне перевищення коефіцієнтів адвекції порівняно з коефіцієнтами дифузії, то запропоновано новий підхід до числового розв'язування такого роду задач, що базується на заміні у постановці задачі невідомої функції експоненціальною та зворотній заміні у варіаційному формулюванні задачі. За допомогою числових експериментів показано, що запропонований підхід дає хороший результат. Результати продемонстровано для одновимірної задачі адвекції-дифузії, що описує поширення ліків у стінці судини, та виконано порівняння з точним розв'язком. У перспективі – застосування цього підходу для двовимірних нестационарних задач адвекції-дифузії-реакції.

1. *Карташов Э. М.* Аналитические методы в теории теплопроводности твердых тел. – Москва: Высш. шк., 1985. – 480 с.
2. *Савула Я. Г.* Числовий аналіз задач математичної фізики варіаційними методами. – Львів: Видавн. центр ЛНУ ім. І. Франка, 2004. – 221 с.
3. *Савула Я., Турчин Ю., Кім Н.* Комп'ютерне моделювання процесу перенесення ліків у живих тканинах // Вісн. Львів. ун-ту. Сер. Прикл. математика та інформатика. – 2013. – Вип. 19. – С. 93–98.
4. *Турчин Ю.* Експоненціальна заміна у методі скінченних елементів для рівнянь адвекції-дифузії // Фіз.-мат. моделювання та інформ. технології. – 2016. – Вип. 24. – С. 111–117.
5. *D'Angelo C., Formaggia L., Minisini S., Vergara C., Zunino P.* Mathematical models and numerical simulation of drug release in the vascular system // Workshop IV: Optimal Transport in the Human Body – Lungs and Blood, UCLA-IPAM, 19–23 May 2008. – 60 p.



6. Hecht F., Pironneau O., Le Hyaric A., Ohtsuka K. FreeFEM++ Version 2.9 CiteSeerX. – Paris: Labolatoire Jacques-Louis Lions. – 258 p.  
– <http://www.freefem.org/ff++>
7. Hossain S. S., Hossainy S. F. A., Bazilevs Y., Calo V. M., Hughes T. J. R. Mathematical modeling of coupled drug and drug-encapsulated nanoparticle transport in patient-specific coronary artery walls // Comput. Mech. – 2012. – **49**, No. 2. – P. 213–242. – <https://doi.org/10.1007/s00466-011-0633-2>.
8. Hussain F., Karim M. S. Accurate evaluation schemes for triangular domain integrals // IOSR. J. Mech. Civil Eng. – 2012. – **2**, No. 6. – P. 38–51.  
<https://doi.org/10.9790/1684-0263851>.

#### ОБ ОДНОМ ПОДХОДЕ К ЧИСЛЕННОМУ РЕШЕНИЮ ЗАДАЧ МАССОПЕРЕНОСА С БОЛЬШИМИ ЧИСЛАМИ ПЕКЛЕ

Рассмотрена математическая модель распространения лекарств в стенке сосуда. Модель описывается краевой задачей адвекции-диффузии для системы двух дифференциальных уравнений. В связи со спецификой входных параметров задачи – коэффициентов адвекции значительно превышает коэффициент диффузии – применение классического метода конечных элементов с линейными и квадратичными базисными функциями приводит к потере устойчивости вычислительного процесса. В работе предложен новый подход к решению задач адвекции-диффузии с большими числами Пекле, основанный на замене искомой функции экспоненциальной в формулировке задачи и обратной замене при применении метода конечных элементов. Проведен численный анализ результатов применения предложенного метода к приближенному решению задачи распространения лекарств в стенке сосуда.

**Ключевые слова:** уравнение адвекции-диффузии, метод конечных элементов, потеря устойчивости решения, число Пекле.

#### ON ONE APPROACH TO NUMERICAL SOLUTION OF THE MASS TRANSFER PROBLEMS WITH LARGE PECLET NUMBERS

The mathematical model of distribution of drugs in the vessel wall is considered. The model is described by the advection-diffusion boundary-value problem of for a system of two differential equations. Due to the specifics of the input parameters of the problem, when advection coefficients significantly exceeds the diffusion coefficients, the application to solving the problem of the classical method of finite elements with linear and quadratic basis functions leads to loss of stability of the computational process. The paper proposes a new approach to solving advection-diffusion problems with large Peclet numbers, based on replacing the unknown function by exponential in the formulation of the problem and back-replacing during applications the finite element method. A numerical analysis of the results of applying the proposed method to an approximate solution of the problem of the distribution of drugs in the vessel wall is carried out.

**Key words:** advection-diffusion equation, finite elements method, loss of stability of solution, Peclet number.

Львів. нац. ун-т ім. І. Франка, Львів

Одержано  
19.02.18