DOI: 10.3842/nosc.v27i3.1477

УДК 517.9

УМОВИ ІСНУВАННЯ РОЗВ’ЯЗКІВ КРАЙОВИХ ЗАДАЧ ДЛЯ СИСТЕМ КІНЕТИЧНИХ РЕАКЦІЙ

Олександр Покутний

Інститут математики НАН України
вул. Терещенківська, 3, Київ, 01021, Україна
e-mail: alex_poker@imath.kiev.ua

Ігор Сігаєв

Київський національний університет імені Тараса Шевченка
просп. акад. Глушкова, 4-Д, Київ, 02000, Україна
e-mail: igor.sigaev@gmail.com

We develop a method of solution of boundary-value problems for nonlinear systems of differential equations that describe models of kinetic reactions. We obtain conditions of bifurcation and branching of solutions of the corresponding problems.

Розроблено методику розв’язування крайових задач для нелінійних систем диференціальних рівнянь, що описують моделі кінетичних реакцій. Одержано умови біфуркації і розгалуження розв’язків відповідних задач.

1. Вступ. У цій статті наведено постановки прикладних задач, до яких можна застосувати методику й теорію, розроблену в [1]. На прикладі двовимірної нелінійної задачі буде показано, яким чином ця методика працює. Припустимо, що ми розглядаємо обмін субстанціями між двома контейнерами, які згідно з [2, с. 114] названо секціями 1, 2. За певних умов, коли $X_1(t,\varepsilon), X_2(t,\varepsilon), Y_1(t,\varepsilon), Y_2(t,\varepsilon) \geq 0$ маємо систему звичайних диференціальних рівнянь

$$\begin{aligned}
\frac{dX_1(t,\varepsilon)}{dt} &= -BX_1(t,\varepsilon) - X_1(t,\varepsilon) + D_X(X_2(t,\varepsilon) - X_1(t,\varepsilon)) + \varepsilon X_1^2(t,\varepsilon)Y_1(t,\varepsilon) + A,\\
\frac{dY_1(t,\varepsilon)}{dt} &= BX_1(t,\varepsilon) + D_Y(Y_2(t,\varepsilon) - Y_1(t,\varepsilon)) - \varepsilon X_1^2(t,\varepsilon)Y_1(t,\varepsilon),\\
\frac{dX_2(t,\varepsilon)}{dt} &= -BX_2(t,\varepsilon) - X_2(t,\varepsilon) + D_X(X_1(t,\varepsilon) - X_2(t,\varepsilon)) + \varepsilon X_2^2(t,\varepsilon)Y_2(t,\varepsilon) + A,\\
\frac{dY_2(t,\varepsilon)}{dt} &= BX_2(t,\varepsilon) + D_Y(Y_1(t,\varepsilon) - Y_2(t,\varepsilon)) - \varepsilon X_2^2(t,\varepsilon)Y_2(t,\varepsilon),
\end{aligned} \tag{1}$$

із загальними крайовими умовами

$$\ell_1 X_1(\cdot,\varepsilon) + \ell_2 X_2(\cdot,\varepsilon) + \ell_3 Y_1(\cdot,\varepsilon) + \ell_4 Y_4(\cdot,\varepsilon) = \alpha, \tag{2}$$

де ε — достатньо малий параметр. Додаємо їх, для того щоб дослідити можливі збурення та граничні цикли у наведених моделях. Концентрації для початкових компонент є сталими; $\ell_i,\ i = \overline{1,4},$ — лінійні вектор-функціонали, що переводять розв'язки системи рівнянь у деякий скінченновимірний простір R^m. Один із прикладів задачі (1), (2) — це періодична крайова задача. Розглянуту модель можна узагальнити на скінченну кількість концентрацій. При певних умовах, коли $X_1(t), X_2(t), Y_1(t), Y_2(t) \geq 0$, а крайові умови мають вигляд

$$X_1(0) + X_2(0) + Y_1(0) + Y_2(0) = 1,$$

задача (1), (2) є моделлю динаміки популяцій (відповідні компоненти є пропорціями відповідних видів).

У більш загальному випадку отримаємо крайову задачу для зв'язаної системи [3] операторно-диференціальної системи рівнянь у функціональному просторі $\mathcal{H}$ (у банаховому або гільбертовому просторі)

$$\begin{aligned}
\frac{dX_i(t,\varepsilon)}{dt} &= A^1_{ii}(t)X_i(t,\varepsilon) + B^1_{ii}(t)Y_i(t,\varepsilon)\\
&\quad + \varepsilon R^1_i(X_1(t,\varepsilon),\ldots,X_{i-1}(t,\varepsilon),X_{i+1}(t,\varepsilon),Y_1(t,\varepsilon),\ldots,Y_n(t,\varepsilon)) + H^1_{ii}(t),\\
\frac{dY_i(t,\varepsilon)}{dt} &= A^2_{ii}(t)(t,\varepsilon)X_i(t,\varepsilon) + B^2_{ii}(t)Y_i(t,\varepsilon)\\
&\quad + \varepsilon R^2_i\big(X_1(t,\varepsilon),\ldots,X_n(t,\varepsilon),Y_1(t,\varepsilon),\ldots,Y_{i-1}(t,\varepsilon),Y_{i+1}(t,\varepsilon),\ldots,Y_n(t,\varepsilon)\big)\\
&\quad + H^2_{ii}(t),
\end{aligned} \tag{3}$$

$$\sum_{i=1}^{n} \ell^1_i X_i(\cdot,\varepsilon) + \sum_{i=1}^{n} \ell^2_i Y_i(\cdot,\varepsilon) = \alpha. \tag{4}$$

Ця задача моделює також багато нейронних мереж [4]. Можемо отримати апріорні оцінки для таких задач [5] і умови стійкості входу за станом.

Більш того, за додаткових умов можна встановити наявність хаосу [6, 7]. Метою роботи є дослідження розв'язності й знаходження розв'язків крайових задач (1), (2) і (3), (4), які при $\varepsilon = 0$ перетворюються на один із розв'язків відповідних породжуючих задач.

2. Лінійний випадок. У лінійному випадку, коли $\varepsilon = 0$, для задачі (1), (2) відповідна породжуюча задача крайова задача має вигляд

$$\begin{aligned}
\frac{dX^0_1(t)}{dt} &= -(B + 1 + D_X)X^0_1(t) + D_X X^0_2(t) + A,\\
\frac{dY^0_1(t)}{dt} &= BX^0_1(t) - D_Y Y^0_1(t) + D_Y Y^0_2(t),\\
\frac{dX^0_2(t)}{dt} &= D_X X^0_1(t) - (B + 1 + D_X)X^0_2(t) + A,
\end{aligned} \tag{5}$$

$$\frac{dY_2^0(t)}{dt} = BX_2^0(t) + D_Y Y_1^0(t) - D_Y Y_2^0(t)$$

з крайовими умовами

$$\ell_1 X_1^0(\cdot) + \ell_2 X_2^0(\cdot) + \ell_3 Y_1^0(\cdot) + \ell_4 Y_4^0(\cdot) = \alpha. \tag{6}$$

Для простоти побудови загальної теорії розглянемо двовимірний випадок; він досить відомий і має назву брюселятора [8] двоточкової крайової задачі (далі формула (7)) із загальними крайовими умовами [2, с. 112]. Навіть більше, розглянемо так звану задачу біфуркації або розгалуження розв'язків відповідної системи із загальними крайовими умовами. Як приклад вивчимо двоточкову крайову задачу, яка має вигляд

$$\begin{aligned} X'(t,\varepsilon) &= -(B+1)X(t,\varepsilon) + \varepsilon X^2(t,\varepsilon)Y(t,\varepsilon) + A(t), \\ Y'(t,\varepsilon) &= BX(t,\varepsilon) - \varepsilon X^2(t,\varepsilon)Y(t,\varepsilon) + D(t), \end{aligned} \tag{7}$$

із загальними крайовими умовами

$$\begin{pmatrix} X(\cdot,\varepsilon) \\ Y(\cdot,\varepsilon) \end{pmatrix} = \alpha, \tag{8}$$

де ℓ — лінійний векторний функціонал, що переводить розв'язки поставленої задачі у деякий m-вимірний простір ($\alpha \in R^m$). Для прикладу наведемо повну теорію розв'язності у так званому випадку двоточкової крайової задачі. При цьому функціонал ℓ і вектор α можна подати у вигляді

$$\ell\begin{pmatrix} X(\cdot,\varepsilon) \\ Y(\cdot,\varepsilon) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} X(0,\varepsilon) - X(T,\varepsilon) \\ Y(0,\varepsilon) - Y(T,\varepsilon) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix}. \tag{9}$$

Задача полягає у знаходженні розв'язків $X(t,\varepsilon)$, $Y(t,\varepsilon)$ крайової задачі (7), (9), які при $\varepsilon = 0$ перетворюються на один із розв'язків породжуючої лінійної крайової задачі

$$\begin{aligned} X_0'(t) &= -(B+1)X_0(t) + A(t), \\ Y_0'(t) &= BX_0(t) + D(t) \end{aligned} \tag{10}$$

з крайовими умовами

$$\begin{pmatrix} X_0(0) - X_0(T) \\ Y_0(0) - Y_0(T) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix}. \tag{11}$$

Слід зауважити, що у розглянутій моделі $A(t) = A$ і $D(t) = 0$. Розглядаємо нестаціонарний випадок для дослідження нелінійної крайової задачі. Загальний розв'язок системи рівнянь має вигляд

$$X_0(t, c_1) = c_1 e^{-(B+1)t} + \int\limits_0^t A(\tau) e^{-(B+1)(t-\tau)} d\tau, \tag{12}$$

$$Y_0(t, c_1, c_2) = c_2 - \frac{c_1 B}{B+1}\left(e^{-(B+1)t} - 1\right) + \int_0^t D(\tau)\, d\tau + B\int_0^t ds \int_0^s A(\tau)e^{-(B+1)(s-\tau)}\, d\tau. \tag{13}$$

Підставляючи відповідні розв'язки у крайову умову (11), отримаємо систему рівнянь щодо сталих $c_1,\ c_2$:

$$\begin{aligned} c_1\left(1 - e^{-(B+1)T}\right) &= \alpha_1 + \int_0^T A(\tau)e^{-(B+1)(T-\tau)}\, d\tau, \\ -\frac{B}{B+1}\, c_1\left(1 - e^{-(B+1)T}\right) &= \alpha_2 + \int_0^T D(\tau)\, d\tau + B\int_0^T ds \int_0^s A(\tau)e^{-(B+1)(s-\tau)}\, d\tau. \end{aligned} \tag{14}$$

Бачимо, що отримана система не завжди розв'язна і має неєдиний розв'язок.

Розглянемо випадок $B \neq -1,\ B \neq 0.$ Тоді умова розв'язності набуває вигляду

$$g_1 = -\frac{B+1}{B}\, g_2,$$

де

$$g_1 = \alpha_1 + \int_0^T A(\tau)e^{-(B+1)(T-\tau)}\, d\tau,$$

$$g_2 = \alpha_2 + \int_0^T D(\tau)e^{-(B+1)(T-\tau)}\, d\tau + B\int_0^T ds \int_0^s A(\tau)\, d\tau$$

або у розгорнутому вигляді

$$\alpha_1 + \int_0^T A(\tau)e^{-(B+1)(T-\tau)}\, d\tau = -\frac{B+1}{B}\left(\alpha_2 + \int_0^T D(\tau)\, d\tau + B\int_0^T ds \int_0^s A(\tau)e^{-(B+1)(s-\tau)}\, d\tau\right).$$

У цьому випадку система рівнянь (13) має множину розв'язків

$$c_1 = \frac{g_1}{1 - e^{-(B+1)T}} \quad \forall c_2 \in R.$$

У нашому випадку $A(t) = A,\ D(t) = 0.$ Тоді загальний розв'язок лінійної крайової задачі можна записати так:

$$X_0(t) = \frac{e^{-(B+1)t} g_1}{1 - e^{-(B+1)T}} + \frac{A}{B+1}\left(1 - e^{-(B+1)t}\right), \tag{15}$$

$$Y_0(t,c_2) = c_2 + \frac{g_1 B}{B+1}\,\frac{\left(1-e^{-(B+1)t}\right)}{\left(1-e^{-(B+1)T}\right)} + \frac{AB}{B+1}\left(t + \frac{e^{-(B+1)t}}{B+1} - \frac{1}{B+1}\right). \tag{16}$$

При цьому умова розв'язності матиме вигляд

$$\frac{AB}{(B+1)^2}\,e^{-(B+1)T} = \alpha_2 + \frac{1}{2}\,BAT^2\,\frac{B\alpha_1}{(B+1)^2} + \frac{AB}{(B+1)^2}. \tag{17}$$

Теорема 1. *Крайова задача (10), (11)* ($B \neq -1,\ A(t) = A,\ D(t) = 0$) *розв'язна тоді й лише тоді, коли виконується умова (17). За виконання цієї умови множина розв'язків крайової задачі (10), (11) має вигляд (15), (16).*

3. Нелінійний випадок. Для отримання необхідних і достатніх умов розв'язності зробимо заміну змінних

$$X(t,\varepsilon) = X_0(t) + \overline{X}(t,\varepsilon),$$

$$Y(t,\varepsilon) = Y_0(t,c_2) + \overline{Y}(t,\varepsilon).$$

Тоді крайова задача набуває вигляду

$$\begin{aligned} \overline{X}'(t,\varepsilon) &= -(B+1)\overline{X}(t,\varepsilon) + \varepsilon\big(X_0(t) + \overline{X}(t,\varepsilon)\big)^2\big(Y_0(t,c_2) + \overline{Y}(t,\varepsilon)\big), \\ \overline{Y}'(t,\varepsilon) &= B\overline{X}(t,\varepsilon) - \varepsilon\big(X_0(t) + \overline{X}(t,\varepsilon)\big)^2\big(Y_0(t,c_2) + \overline{Y}(t,\varepsilon)\big) \end{aligned} \tag{18}$$

з нульовими крайовими умовами

$$\begin{aligned} \overline{X}(0,\varepsilon) &= \overline{X}(T,\varepsilon), \\ \overline{Y}(0,\varepsilon) &= \overline{Y}(T,\varepsilon). \end{aligned} \tag{19}$$

Для зручності наведемо розв'язки (7), (8) у такому вигляді:

$$X_0(t) = h_1 e^{-(B+1)t} + h_2,$$

$$Y_0(t,c_2) = c_2 + h_3 e^{-(B+1)t} + h_4 t + h_5.$$

Знайдемо необхідну умову для нелінійної задачі, використовуючи умову розв'язності, наведену у теоремі 1. Будемо розглядати нелінійності у системі як неоднорідності. Тоді

$$A(t) = \varepsilon\big(X_0(t) + \overline{X}(t,\varepsilon)\big)^2\big(Y_0(t,c_2) + \overline{Y}(t,\varepsilon)\big),$$

$$D(t) = -\varepsilon\big(X_0(t) + \overline{X}(t,\varepsilon)\big)^2\big(Y_0(t,c_2) + \overline{Y}(t,\varepsilon)\big).$$

Використовуючи теорему 1 для таких неоднорідностей, після підстановки отримаємо

$$\int\limits_0^T \Big(X_0^2(\tau) + 2X_0(\tau)\overline{X}(\tau,\varepsilon) + \overline{X}^2(\tau,\varepsilon)\Big)\big(Y_0(\tau,c_2) + \overline{Y}(\tau,\varepsilon)\big)e^{-(B+1)(T-\tau)}\,d\tau$$

$$= \frac{B+1}{B} \int\limits_0^T \big(X_0(\tau) + \overline{X}(\tau,\varepsilon)\big)^2 \big(Y_0(\tau, c_2) + \overline{Y}(\tau,\varepsilon)\big)\, d\tau$$

$$- (B+1) \int\limits_0^T ds \int\limits_0^s \big(X_0(\tau) + \overline{X}(\tau,\varepsilon)\big)^2 \big(Y_0(\tau, c_2) + \overline{Y}(\tau,\varepsilon)\big) e^{-(B+1)(s-\tau)}\, d\tau.$$

Переходячи до границі при $\varepsilon \to 0$, отримаємо рівняння для породжуючої сталої c_2:

$$\left(B \int\limits_0^T H_1(\tau) e^{-(B+1)(T-\tau)}\, d\tau - (B+1) \int\limits_0^T H_1(\tau)\, d\tau\right) c_2$$

$$= (B+1) \int\limits_0^T H_1(\tau) H_2(\tau)\, d\tau - B \int\limits_0^T H_1(\tau) H_2(\tau) e^{-(B+1)(T-\tau)}\, d\tau$$

$$- (B+1)B \int\limits_0^T ds \int\limits_0^s H_1(\tau) H_2(\tau) e^{-(B+1)(s-\tau)}\, d\tau, \tag{20}$$

де

$$H_1(t) = \Big(h_1 e^{-(B+1)t} + h_2\Big)^2,$$

$$H_2(t) = h_3 e^{-(B+1)t} + h_4 t + h_5.$$

Таким чином, одержуємо таку необхідну умову існування розв'язків нелінійної крайової задачі (7), (9).

Теорема 2 (необхідна умова)**.** *Нехай крайова задача (7), (9) має розв'язок, який при* $\varepsilon = 0$ *перетворюється на один із розв'язків (15), (16) зі сталою* c_2. *Тоді стала* c_2 *задовольняє рівняння для породжуючих сталих (20).*

Зауваження 1. Задача (7), (9) цікава тим, що незважаючи на нелінійність системи (7) рівняння для породжуючих амплітуд лінійне.

Множина розв'язків нелінійної системи (18) має такий вигляд:

$$\overline{X}(t,\varepsilon, c_1(\varepsilon)) = c_1(\varepsilon) e^{-(B+1)t} + Z_1(t,\varepsilon),$$

$$Z_1(t,\varepsilon) = \varepsilon G_1\big[\,\overline{X}, \overline{Y}\,\big](t,\varepsilon),$$

$$\overline{Y}(t,\varepsilon, c_2) = c_2 - \frac{c_1(\varepsilon) B}{B+1}\Big(e^{-(B+1)t} - 1\Big) + Z_2(t,\varepsilon),$$

$$Z_2(t,\varepsilon) = \varepsilon G_2\big[\,\overline{X}, \overline{Y}\,\big](t,\varepsilon),$$

$$G_1\big[\,\overline{X}, \overline{Y}\,\big](t,\varepsilon) = \int\limits_0^t \big(X_0(t) + \overline{X}(t,\varepsilon)\big)^2 \big(Y_0(t, c_2) + \overline{Y}(t,\varepsilon)\big)\, d\tau,$$

$$G_2\big[\,\overline{X},\overline{Y}\,\big](t,\varepsilon) = -\int\limits_0^t \big(X_0(t)+\overline{X}(t,\varepsilon)\big)^2\big(Y_0(t,c_2)+\overline{Y}(t,\varepsilon)\big)\,d\tau$$

$$+\,B\int\limits_0^t ds\int\limits_0^s \big(X_0(t)+\overline{X}(t,\varepsilon)\big)^2\big(Y_0(t,c_2)+\overline{Y}(t,\varepsilon)\big)e^{-(B+1)(s-\tau)}\,d\tau.$$

Підставляючи розв'язок у крайову умову, отримаємо рівняння для знаходження сталої $c_1(\varepsilon)$:

$$c_1(\varepsilon) = \varepsilon e^{(B+1)T}\int\limits_0^T \big(\overline{X}(\tau,\varepsilon)+X_0(\tau)\big)^2\big(\overline{Y}(\tau,\varepsilon)+Y_0(\tau,c_2)\big)\,d\tau.$$

За аналогією з методикою, розробленою в [1], отримаємо достатню умову існування розв'язку нелінійної крайової задачі.

Теорема 3 (достатня умова існування розв'язку)**.** *Якщо стала c_2 задовольняє рівняння для породжуючих констант (20), то крайова задача (18), (19) має розв'язок, який можна знайти за допомогою ітераційного процесу*

$$c_1^k(\varepsilon) = \varepsilon e^{(B+1)T}\int\limits_0^T \big(\,\overline{X}_k(\tau,\varepsilon)+X_0(\tau)\big)^2\big(\,\overline{Y}_k(\tau,\varepsilon)+Y_0(\tau,c_2)\big)\,d\tau,$$

$$Z_1^{k+1}(t,\varepsilon) = \varepsilon G_1\Big[\overline{X}^{\,k},\overline{Y}^{\,k}\Big](t,\varepsilon),$$

$$Z_2^{k+1}(t,\varepsilon) = \varepsilon G_2\Big[\overline{X}^{\,k},\overline{Y}^{\,k}\Big](t,\varepsilon),$$

$$\overline{X}^{k+1}(t,\varepsilon) = c_1^k(\varepsilon)e^{-(B+1)t} + Z_1^{k+1}(t,\varepsilon),$$

$$\overline{Y}^{k+1}(t,\varepsilon) = c_2 - \frac{c_1^k(\varepsilon)B}{B+1}\big(e^{-(B+1)t}-1\big) + Z_2^{k+1}(t,\varepsilon).$$

Зауваження 2. Оскільки корінь c_2 простий, то необхідна умова є й достатньою для існування розв'язку.

4. Висновки. Слід зауважити, що розглянута тематика актуальна і її досліджують багато вчених (див., наприклад, роботи [9 – 12]).

Від імені всіх авторів відповідальний за листування заявляє про відсутність конфлікту інтересів. Усі необхідні дані містяться в статті. Всі автори зробили рівномірний внесок у цю роботу. Роботу виконано за часткової фінансової підтримки Simons Foundation (грант 1290607, О. Покутний).

Література

1. О. А. Бойчук, О. О. Покутний, *Нормально-розв'язні крайові задачі для операторно-диференціальних рівнянь*, Наукова думка, Київ (2022); DOI: 10.37863/2843457491-61.
2. N. Prigogine, *From being to becoming: time and complexity in physical sciences*, Freeman and Co., San Francisco (1980);

3. S. Dashkovskiy, V. Slynko, *Dwell-time stability conditions for infinite dimensional impulsive systems*, Automatica J. IFAC, **147**, Paper No. 110695 (2023); DOI: 10.1016/j.automatica.2022.110695.
4. A. A. Boichuk, O. O. Pokutnyi, V. A. Feruk, D. S. Bihun, *Minimizing of the quadratic functional on Hopfield networks*, Electron. J. Qual. Theory Differ. Equat., **2021**, Paper No. 92 (2021); DOI: 10.14232/ejqtde.2021.1.92.
5. D. A. Klyushin, S. I. Lyashko, D. A. Nomirovskii, V. V. Semenov, Yu. I. Petunin, *Generalized solutions of operator equations and extreme elements*, Springer, Berlin (2012).
6. J. Lawrynowicz, L. Wojtczak, A. Niemczynovicz, *Zwanzig's trajectories used in relation to thermodynamical chaos for spin wave description*, Internat. J. Bifur. Chaos Appl. Sci. Engrg., **24**, № 5, Article 1450058 (2014); DOI: 10.1142/SO218127414500588.
7. O. V. Kapustyan, V. S. Melnik, J. Valero, V. V. Yasinsky, *Global attractors of multi-valued dynamical systems and evolution equations without uniqueness*, Naukova Dumka, Kyiv (2008).
8. G. Nikolis, I. Prigogine, *Self-organization in non-equilibrium systems*, Wiley-Interscience [John Wiley & Sons], New York, London, Sydney (1977).
9. W. Greenberg, C. Mee, V. Protopopescu, *Boundary value problems in abstract kinetic theory*, Operator Theory: Advances and Applications, Birkhäuser Verlag, Basel (2013); DOI: 10.1007/978-3-0348-5478-8525.
10. C. V. Pao, L. Zhou, J. Jin, *Multiple solutions of a boundary-value problem in enzyme kinetics*, Adv. in Appl. Math., **6**, 209 – 229 (1985); DOI: 10.1016/0196-8858(85)90012-0.
11. A. Dandgaval, St. Alone, K. Prakash, *Application of boundary-value problem in thermodynamics and kinetics*, Neuroquantology, **21**, № 7 (2023); DOI: 10.48047/nq.2023.21.7.nq23105.
12. N. Batens, Roger Van Keer, *A numerical method for a free boundary-value problem arising from chemical kinetics*, J. Comput. Appl. Math., **111**, № 1-2, 187 – 199 (1999); DOI: org/10.1016/S0377-0427(99)00142-9.

Одержано 12.06.24,
після доопрацювання — 15.09.24