الباب الثالث

طرق عددية لمعادلات تفاعل الانتشار

Numerical Methods for Reaction-Diffusion Equations

الملخص: هذا هو الباب الثالث من كتاب النمذجة الرياضية للحساسات الحيوية. قد تم تكريس هذا الجزء للمفاهيم الأساسية لنظرية مخططات الفرق المحدود للحل الرقمي لمعادلات الانتشار الخطية التي تمثل القاعدة لنمذجة الحساسات الحيوية. يُقدم هذا الباب الحقائق ذات الصلة حول المفاهيم الأساسية لنظرية مخططات الفرق المحدود لمعادلات الانتشار الخطية. يعرض مخططات الفرق الفعال الأكثر رواجاً لمعادلات تفاعل الانتشار غير الخطية. يتم مناقشة المفاهيم الطبيعية الأساسية وكونها كافية لحل مسائل الحساس الحيوي. كما يتم تطبيق مخططات الفرق على نطاق واسع في حل مسائل الحساس الحيوي.

كلمات البحث: مخطط الفرق المحدود، والمعادلات التفاضلية الجزئية PDE، ومعادلة تفاعل الانتشار.

مخططات الفرق لمعادلات الانتشار

The Difference Schemes for the Diffusion Equation

تكتسب الطرق العددية المعاصرة لحل المسائل في الكيمياء الرياضية mathematical chemistry شعبية متزايدة. هدف هذا الفصل هو تزويد القارئ بالحقائق ذات الصلة حول المفاهيم الأساسية لنظرية مخططات الفرق لمعادلات الانتشار الخطية. معادلات الانتشار الخطية تلعب دوراً مهماً وحاسماً في معظم نماذج نظرية الحساس الحيوي. الدافع وراء اختيار طرق الفرق لحل هذه المعادلات كان بالحجتين التاليتين:

- الهندسة (الحجم) لحساس حيوي لا يتغير حقاً خلال القياسات؛
- البساطة والكفاءة لطريقة الفرق.

نعرض هنا مخططات الفرق الفعالة والبسيطة والأكثر شعبية معاً. يتم تطبيق مخططات الفرق هذه على نطاق واسع لحل مسائل الحساسات الحيوية في الفصل التالي. يتم استخدام هذه الطريقة كثيراً في حل المسائل التطبيقية ليس فقط من قبل علماء الرياضيات المحترفين، لكن أيضاً من قبل غير المتخصصين. المفاهيم المقدمة

أدناه ذات طابع ابتدائي وكافية لحل مسائل الحساس الحيوي. تم تطبيق الترميز بشكل أساسي في هذا الكتاب [222]. العديد من سمات الطرق العددية لحل المعادلات التفاضلية الجزئية موجودة في [5، 12، 187، 222].

١ -الشبكات The Grids

سوف نعتبر أحادي الأبعاد في معادلة انتشار فضاء بمعاملات ثابتة ومخططات الفرق من أجل تطوير الطرق المختلفة لتصميم مخططات ملائمة للمسائل اللاخطية ومتعددة الأبعاد لنظرية الحساس الحيوي الرياضية. تركيب معادلة الفرق يُقرب المعادلة التفاضلية ذات المقادير المهمة لأداء العمليات التالية:

- لاستبدال مجال المتغير المتقطع من سعة argument إلى مجال المتغير المتصل.
- لفرض نظائر الفرق للشروط الحدية والبيانات الابتدائية.

من الواضح، في الحل العددي للمسائل الرياضية أنه غير واقعي لإعادة إنتاج حل الفرق لكل قيم سعة المتغير في مجال معين. إن الطريقة التقليدية في تغطية هذا هي اختيار بعض المجموعات المحددة للنقاط في هذا المجال والبحث عن حل تقريبي فقط في تلك النقاط. أي مجموعة من تلك النقاط تسمى شبكة والنقاط المعزولة تسمى عُقد الشبكة grid nodes. أي دالة معرفة في النقاط العُقدية nodal points تسمى دالة الشبكة. لهذا السبب فإن زمن الحل، و خواص حل الفرق، والاقتراب من حل مضبوط تعتمد جميعها بشكل أساسي على الاختيار الصحيح للشبكة. سوف نعطي عدة أمثلة بسيطة للشبكات.

١ , ١ شبكة متساوية البعد في المستقيم An Equidistant Grid in the Straight

نعتبر الآن مجموعة الدوال $u\ (x)$ في الجزء $[0,d]$. يـتم تقسـم الجـزء $[0,d]$ مـن الطول d إلى فترات متساوية n. المسافة بـين عُقـدتين متجـاورتين $x_i - x_{i-1} = h = d/n$ تسمى خطوة الشبكة أو ببساطة خطوة. إن نقـاط التقسـيم أو الانشـطار $x = x_i = ih$ تشكل ما يسمى مجموعـة عُقـد الشـبكة $\Omega_h = \{x_i = ih,\ i = 1,\dots,\ n\text{-}1\}$ وتولـد شـبكة محتملة واحدة على هذا الجزء $[0, d]$ (الشكل رقم ١).

عندما توضع النقطة الحدية $x_0 = 0$ و $x_n = d$ جنبـاً إلى جنـب مـع الشـبكة Ω_h، فسوف يرمز إليها بواسطة $\bar{\Omega}_h = \{x_i = ih,\ i = 1,\dots,\ n\text{-}1\}$. في الجـزء $[0,d]$ نعمـل مـع دالة جديدة $u_h(x_i)$ للسعة المتقطعة بدلاً من الدالة المعطاة $u(x)$ للمتغـير المتصـل. يـتم حساب القيم لمثل هذه الدالة في عُقد الشبكة x_i، وتعتمـد الدالـة في حـد ذاتهـا عـلى الخطوة h وكذلك على البارامتر.

تعريف (١)

الدالة $u(x_i)$ المعرفة على عُقد $\bar{\Omega}_h$ الشبكة x_i تسمى دالة الشبكة.

لذلك الدالة $u_h(x_i)$ هي دالة الشبكة.

الشكل رقم (١). شبكة متساوية البعد على الجزء.

٢ , ١ شبكة غير متساوية البعد في مستقيم A Non-equidistant Grid in a Straight

يُركز المثال التالي على الجـزء $0 \le x \le d$ بفـترات فرعيـة n دون اهـتمام لكيفيـة اختيار النقاط $0 < x_1 < x_2 \dots < x_{n-1} < d$. تُشكل العُقد $\{x_i,\ i = 0,\dots,n,\ \ x_0 = 0,\ \ x_n = d\}$

ما يسمى شبكة غير متساوية البعد $\hat{\Omega}_h$ على $[0,d]$ (الشكل رقم ٢). المسافة بين العُقد المتجاورة، كونها خطوة الشبكة، تساوي $h_i = x_i - x_{i-1}$ وتعتمد على الحرف التحتي i. وينبغي أن تلبي الخطوات شرط التعبير $\sum_{i=1}^{n} h_i = d$. أي مسافة لهذا النوع تقع ضمن فئة دوال الشبكة. الخطوة h_i تأخذ أصغر ما في المنطقة حيث إن تباين الدالة (مشتق الدالة) هو الأكبر وتؤخذ الخطوة h_i أكبر في المنطقة حيث إن تباين الدالة هو الأصغر. عادة ما يتم عمل ذلك من أجل اختزال خطأ الحل.

الشكل رقم (٢). شبكة غير متساوية البعد على الجزء.

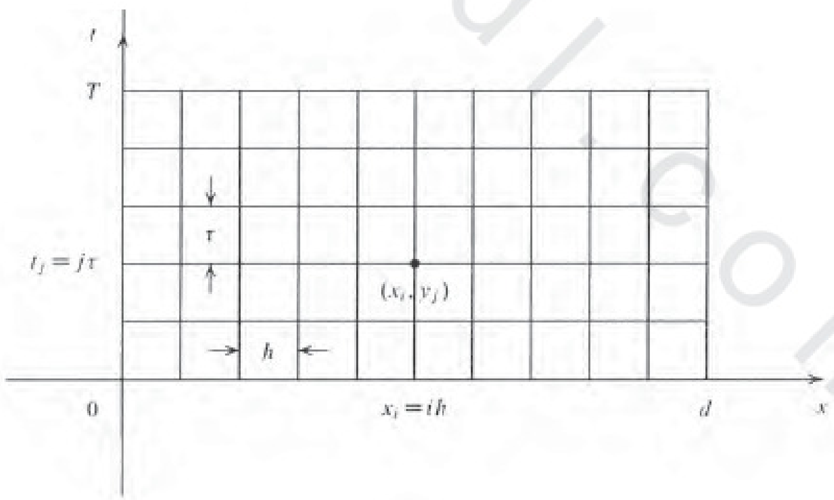
٣,١ شبكة متساوية البعد في مستوى The Equidistant Grid in a Plane

ندرس الآن مجموعة الدوال $u(x, t)$ لسعتين في المستطيل $\overline{Q} = \{0 \le x \le d,\ \ 0 \le t \le T\}$. نظراً لأن العمليات في النظرية الرياضية للحساس الحيوي غير ثابتة فمن المهم فصل الزمن والإحداثيات المكانية. مستقبلاً سوف نرمز للزمن بـ t والإحداثيات المكانية بـ x، y و z. والآن سوف نقسم الجزء $[0,\ d]$ على المحور -x والجزء $[0, T]$ على المحور -t إلى الأجزاء n و m بالخطوات $h = d/n$ و $\tau = T/m$ على التوالي. بعد ذلك، نرسم خطوط مستقيمة موازية للمحاور المناسبة من خلال نقاط التقسيم. تتبنى نقاط تقاطع هذه الخطوط، كالمعتاد، كالعُقد $(x_i,\ t_j) = (ih,\ j\tau)$، $i = 0,\ 1,\ \ldots,\ n$، $j = 0,\ 1,\ \ldots,\ m$، التي تشكل شبكة واسعة النطاق $\overline{Q}_{h\tau} = \{(x_i, t_j) \in \overline{Q}\}$ بخطوات h و τ على طول الاتجاهات Ox و Ot على التوالي

(الشكل رقم ٣). العُقد الواقعة على نفس الخط المستقيم (أفقي أو رأسي)، والمسافة بينها تساوي خطوة الشبكة (h أو τ)، تسمى عُقد الشبكة المتجاورة. تسمى العُقد (x_i, t_j) داخل المنطقة $\overline{Q}$ العُقد الداخلية. العُقد على الحدود $x = 0$، $x = d$، $t \in [0, T]$ تعرف باسم العُقد الحدية، والعُقد على $t = 0$، $x \in [0, d]$ معروفة باسم العُقد الابتدائية. العُقد

$$(x_i, t_j),\ i = 1, 2, \ldots, n\text{-}1,\ j = 1, 2, \ldots, m$$

من مجموعة النقاط الداخلية. عادة، تطبق شبكة متساوية البعد في مستوى عندما يكون التغيير للدالة $u(x, t)$ هو نفسه تقريباً على المستطيل $\overline{Q}$. إذا كان تغيير الدالة مختلفاً في المستطيل $\overline{Q}$ فإنه يتم تطبيق شبكة غير متساوية البعد في مستوى.



الشكل رقم (٣). شبكة متساوية البعد في المستوى.

٤ , ١ شبكة غير متساوية البعد في مستوى The Non-equidistant Grid in a Plane

يمكن معاملة الشبكة غير متساوية البعد في مستوى بطريقة مشابهة. نـدرس الآن مجموعـة دوال $u\ (x,\ t)$، لسـعتين في المسـتطيل $\overline{Q}=\{0\le x\le d,\quad 0\le t\le T\}$. تشكل العُقد $\{(x_i\ ,\ t_j),\ i=0,\ldots,\ n,\ x_0=0,\ x_n=d,\ j=0,\ 1,\ldots,\ m,\ t_0=0,\ t_m=T\}$ مـا يسمى شبكة غير متساوية البعد $\overline{Q}_{h\tau}=\{(x_i,t_j)\in\overline{Q}\}$. المسافة بـين العُقـد المتجـاورة، كونها خطوة الشبكة، تساوي $h_i=x_i-x_{i-1}$ على طول الاتجاهات Ox و $\tau_j=t_j-t_{j-1}$ على طول الاتجاهات Ot على التوالي. تعتمد خطوات الشبكة على الحروف التحتيـة i و j. ينبغي للخطوات استكمال شروط التعبير $\sum_{i=1}^{n}h_i=d$ و $\sum_{j=1}^{m}\tau_j=T$.

كما في الحالة السابقة فإن أي مسافة بين نقاط الشبكة المتجاورة تقع ضمن فئة دوال الشبكة. تؤخذ الخطوات h_i أو τ_j الأصغر في المنطقـة حيـث إن التبـاين للدالـة (المشتقات الجزئية للدالة) هو الرئيس وتؤخذ خطـوات h_i أو τ_j الأكـبر في المنطقـة، حيث إن التباين للدالة هو الأصغر.

٥ , ١ الشبكة في حالة متعددة الأبعاد The Grid in a Multidimensional case

يتم عرض شبكة متعددة الأبعاد بنفس الطريقة المماثلـة. نـدرس مجموعـة الدوال $u\ (x,\ y,\ z,\ t)$ في المنطقة $\overline{Q}$، حيث إن

$$\overline{Q}=\overline{\Omega}\times[0,T],\ \ \overline{\Omega}=\{(x,y,z):0\le x\le d_x,\ 0\le y\le d_y,\ 0\le z\le d_z\}.$$

في حالة الشـبكة الموحدة نتخذ خطوات الشبكة h_x، h_y، وh_z على المحـــاور x، y، z و τ على المحور t. إن نقاط الشبكة هي

$$(x,\ y,\ z,\ t)=(x_i,\ y_k,\ z_l,\ t_j),\ i=0,\ 1,\ \ldots,\ n_x,\ k=0,\ 1,\ldots,n_y,\ l=0,1,..,n_z,\ j=0,1,\ldots,m$$

تستوفي الخطوات شروط التعبير

$$h_x n_x = d_x,\quad h_y n_y = d_y,\quad h_z n_z = d_z,\quad \tau m = T.$$

تم تعريف سطح موازي السطوح $\overline{\Omega}$ parallelepiped ليكون $\partial\Omega$. العُقد (x_i, y_k, z_l, t_j) داخل المنطقة $\overline{Q}$ تسمى العُقد الداخلية. العُقد على الحدود $\partial\Omega\times[0,T]$ معروفة بالنقاط الحدية. العُقد

$$(x_i, y_k, z_l, t_j),\ i = 1,2,\ \ldots,\ n_x\text{-}1,\quad k = 1,2,\ldots,n_y\text{-}1,\ \ l = 1,2,..,n_z\text{-}1,\quad j = 1,2,\ldots,m$$

من مجموعة النقاط الداخلية. يمكن للمرء أن يقدم شبكة غير متساوية البعد في الحالة متعددة الأبعاد. إن إجراءات بناء الشبكة مشابهة لذلك المجال ثنائي الأبعاد.

٢- التقريب لمشتقات الدالة The Approximation of the Function Derivatives

١ , ٢ المشتقة من الرتبة الأولى The Derivative of the First Order

تقريب الفرق لمشتقات الدالة هو الخطوة الأولى في بناء طريقة لإيجاد حل للمسائل التفاضلية. بعد ذلك نطور التقريب لمشتقة الدالة من الرتبة الأولى. تقريب مشتقات الدوال يستند على تعريف مشتقة الدالة الأولى

$$u'(x) = \lim_{h\to 0}\frac{u(x+h)-u(x)}{h}.$$

يتم الحصول على مشتقات الفرق عندما يتم رفض النهاية، يتم أخذ قيمة محدودة بعض الشيء من h، يتم الحصول على المساواة التقريبية

$$u'(x) \approx \frac{u(x+h)-u(x)}{h}.$$

دعنا نثبّت نقطة ما x على المحور Ox من خلال التقاط نقاط متجاورة x-h و x+h، حيث إن الخطوة $h > 0$. ومن ثم سوف نقدم التعبيرين التاليين لمشتقات الفرق:

مشتقة الفرق الأيمن

$$\frac{u(x+h)-u(x)}{h}=u_x,$$

مشتقة الفرق الأيسر

$$\frac{u(x)-u(x-h)}{h}=u_{\bar{x}}.$$

يتم اختيار أسماء مشتقات الفرق وفقاً لموقع النقاط المرتبطة أو المشتركة points engaged في التعريف.

إن السؤال التالي من الأهمية بمكان:

ما الخطأ من تقريب فرق واحد أو آخر وكيف يتصرف الفرق (على سبيل المثال) $\Phi(x) = u'(x) - u_x(x)$ عند نقطة x كما يشير $h \to 0$ إلى الخطأ في تقريب الفرق إلى $u'(x)$ عند نقطة x ؟

في البداية سوف نقدم تعريفاً لرتبة الدالة فيما يتعلق بـ h كـ $h \to 0$.

تعريف (٢)

الدالة $g(h)$ هي الرتبة r فيما يتعلق بـ h إذا كان هناك ثابت c، و $0<c<\infty$، مثل تلك

$$\frac{|g(h)|}{h^r} \le c$$

كما $h \to 0$ ونكتب $g(h) = O(h^r)$.

نعود الآن إلى خطأ تقريب المشتقة. نقوم بتطوير $u(x)$ القادمة في متسلسلة series بواسطة صيغة تايلور حتى المشتقات من الرتبة الثالثة.

$$u(x+h) = u(x) + hu'(x) + \frac{h^2}{2}u''(x) + \frac{h^3}{6}u'''(x_+),$$
$$u(x-h) = u(x) - hu'(x) + \frac{h^2}{2}u''(x) - \frac{h^3}{6}u'''(x_-),$$

بافتراض أن $u(x)$ لتكون دالة ملساء أو منتظمة بما فيه الكفاية، حيث النقاط $x_- \in [x-h, x]$ ، و $x_+ \in [x, x+h]$. الافتراض "دالة ملساء بما فيه الكفاية" يعني أن

$$\max|u'''(x)| \le c < \infty$$

في بعض مناطق الجوار $(x - h_0, x + h_0)$ للنقطة x و $h < h_0$، حيث يتم الحفاظ على العدد h_0 ثابتاً. استبدال متسلسلة تايلور السابقة في تعريف مشتقة الفرق يُنتج التالي:

$$u_x = \frac{u(x+h) - u(x)}{h} = u'(x) + \frac{h}{2}u''(x) + O(h^2),$$
$$u_{\bar{x}} = \frac{u(x) - u(x-h)}{h} = u'(x) - \frac{h}{2}u''(x) + O(h^2).$$

لذا، فإن أخطاء التقريب $\Phi(x)$ لمشتقات الفرق المعرفة هي

$$\Phi(x) = u_x - u = O(h),$$

$$\Phi(x) = u_{\bar{x}} - u' = O(h),$$

تعريف

يقال مشتقة الفرق لتقريب مشتقة الرتبة $r > 0$ عند النقطة x إذا كان

$$\Phi(x) = O(h^r)$$

لذا، يتعين علينا أن تكون درجة التقريب لمشتقة الفرق الأيمن ومشتقة الفرق الأيسر هي 1 على التوالي. علاوة على ذلك، أي جمع خطي مثل

$$u_x^\sigma \equiv \sigma u_x + (1-\sigma)u_{\bar{x}},$$

حيث إن σ عدد حقيقي، ويمكن اعتباره كتقريب الفرق للمشتقة $u'(x)$.

٢ , ٢ التقريب لمشتقة الرتبة الثانية

The Approximation of the Second Order Derivative

تقريب مشتقة من الرتبة الثانية يستند على تعريف المشتقة الأولى. من أجل بناء تقريب الفرق للمشتقة الثانية، فمن الضروري الاعتماد على النمط ثلاثي النقاط $(x-h, x, x+h)$. في تلك الحالة نقدم

$$u_{\bar{x}x} = \frac{u_x - u_{\bar{x}}}{h}.$$

من السهل إثبات أن العلاقة بين مشتقة الفرق الثانية وقيم دالة $u(x-h)$، $u(x)$، $u(x+h)$ تكون:

$$\frac{u(x-h) - 2u(x) + u(x+h)}{h^2} = u_{\bar{x}x}. \qquad (١)$$

كما في الحالة السابقة سوف نقيم خطأ التقريب لمشتقة الرتبة الثانية $u_{\bar{x}x}$. ونطور $u(x)$ القادمة في المتسلسلة بواسطة صيغة تايلور حتى إلى مشتقات الرتبة الرابعة. نحصل على

$$u(x+h)=u(x)+hu'(x)+\frac{h^2}{2}u''(x)\frac{h^3}{6}u''(x)+\frac{h^4}{24}u^{(4)}(x_+),$$
$$u(x-h)=u(x)-hu'(x)+\frac{h^2}{2}u''(x)\frac{h^3}{6}u''\ (x)+\frac{h^4}{24}u^{(4)}(x_-),$$

حيث إن النقاط $x_-\in[x-h,x]$ و $x_+\in[x,x+h]$. وهذا يُنتج خطأ التقريب.

$$\Phi(x)=u_{\bar{x}x}-u''=\frac{h^4}{12}u^{(4)}(\bar{x}),$$

حيث إن $\bar{x}\in[x-h,x+h]$. بافتراض $u(x)$ أنها دالة ملساء بما فيه الكفاية يكون لدينا مشتقة الفرق $u_{\bar{x}x}$ تقرب المشتقة الثانية $u''(x)$ من الرتبة 2، وهذا يعني $u''(x)-u_{\bar{x}x}=O(h^2),$. افتراض وجود دالة ملساء بما فيه الكفاية يعني أن

$$\max\left|u^{(4)}(x)\right|\le c<\infty$$

في بعض المناطق المجاورة $(x-h_0, x+h_0)$ للنقطة x و $h<h_0$، حيث يتم الحفاظ على العدد h_0 ثابتاً.

نتيجة لذلك، توفر مشتقة الفرق $u_{\bar{x}x}$ (1) تقريب الرتبة 2 إذا كانت الدالة $u(x)$ ملساء بما فيه الكفاية.

٢,٣ التقريب لمشتقة الرتبة الثانية على شبكة غير متساوية البعد

The Approximation of the Second Order Derivative on a Non-equidistant Grid

يهتم هذا المثال بشبكة غير متساوية البعد على الجزء $0\le x\le d$ بفترات فرعية n، والعُقد $\{x_i,\ i=0,\ \ldots,\ n,\ x_0=0,\ x_n=d\}$. إن المسافة بين العُقد المتجاورة تساوي $h_i=x_{i+1}-x_i$، وتعتمد على الحرف التحتي i. نقدم التعبيرات التالية

$$u_{\bar{x}_i} = \frac{u(x_i) - u(x_{i-1})}{h_{i-1}},$$

$$u_{x_i} = \frac{u(x_{i+1}) - u(x_i)}{h_i},$$

يتم تقريب مشتقة الرتبة الثانية بالقيمة

$$u_{\bar{x}_i x_i} = \frac{u_{x_i} - u_{\bar{x}_i}}{\hat{h}_i} = \left(\frac{u(x_{i+1}) - u(x_i)}{h_i} - \frac{u(x_i) - u(x_{i-1})}{h_{i-1}} \right) / \hat{h}_i,$$

هنا $\hat{h}_i = (h_i + h_{i-1})/2$. بالنسبة لـ $h_{i-1} = h_i = h$ (شبكة متساوية البعد) السابق يكون متطابقاً مع التعبير (1). سنقوم الآن بحساب خطأ التقريب عند النقطة x_i، وبعد ذلك نطور $u(x)$ في المتسلسلة بصيغة تايلور

$$u(x_i + h_i) = u(x_i) + h_i u'(x_i) + \frac{h_i^2}{2} u''(x_i) + \frac{h_i^3}{6} u'''(x_i) + O(h_i^4),$$

$$u(x_i - h_{i-1}) = u(x_i) - h_{i-1} u'(x_i) + \frac{h_{i-1}^2}{2} u''(x_i) - \frac{h_{i-1}^3}{6} u'''(x_i) + O(h_{i-1}^4),$$

أنه يؤدي إلى المتساويات التالية

$$u(x_i) = u'(x_i) + \frac{h_i}{2} u''(x_i) + \frac{h_i^2}{6} u'''(x_i) + O(h_i^3),$$

$$u_{\bar{x}}(x_i) = u'(x_i) - \frac{h_{i-1}}{2} u''(x_i) + \frac{h_{i-1}^2}{6} u'''(x_i) + O(h_{i-1}^3),$$

$$u_{\bar{x}_i x_i} = u''(x_i) + \frac{h_i - h_{i-1}}{6\hat{h}_i} u'''(x_i) + O(\bar{h}_i^2),$$

حيث إن

$$\bar{h}_i = \max\{h_i, h_{i-1}\}$$

بهذه العلاقات المنظورة، يمكن أن نشتق التعبيرات المفيدة لخطأ التقريب

$$\Phi(x_i) = u''(x_i) - u_{\bar{x}_i x_i} = \frac{h_i - h_{i-1}}{6\hat{h}_i} u'''(x_i) + O(\bar{h}_i^2) = O(\bar{h}_i). \qquad (٢)$$

بناءً على ذلك، توفر مشتقة الفرق $u_{\bar{x}x}$ تقريب الرتبة 1 إذا كانت الدالة $u(x)$ ملساء بما فيه الكفاية. إذا كانت $h_i = h_{i-1}$ إذن خطأ التقريب يكون من الرتبة 2.

٣ – مخطط الفرق الصريح The Explicit Difference Scheme

يستند تقريب الفرق في معادلة الانتشار على استبدال المشتقة الأولى والثانية وبمشتقات الفرق. في هذه الفقرة سوف ندرس معادلة الانتشار سوياً مع الشروط الحدية (لـ $x = 0$، $x = d$) والابتدائية (لـ $t = 0$). تسمى معادلة الانتشار جنباً إلى جنب مع الشروط الحدية والابتدائية بمسألة القيمة الحدية.

سوف نعتبر الآن مسألة القيمة الحدية لمعادلة الانتشار. سنبدأ بأحادي البعد المثال الأسهل في الفضاء. حيث يتم صياغة هذه المسألة بالطريقة التالية: لإيجاد دالة $u(x, t)$ تستوفي معادلة الانتشار

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \qquad (٣)$$

في مستطيل $Q = \{0 < x < d,\ 0 < t \le T\}$ مع الشرط الابتدائي لـ $t = 0$

$$u(x,0) = \varphi(x), \quad x \in [0,d], \qquad (٤)$$

والشرط الحدي

$$u(0,t) = \psi_1(t), \quad u(d,t) = \psi_2(t), \quad t \in [0,T], \qquad (٥)$$

حيث إن $\varphi(t)$، $\psi_1(t)$ و $\psi_2(t)$ هي الدوال المعطاة، ومعامل الانتشار $D > 0$.

أيضًا نفترض بأن حل المسألة (٣)- (٥) موجود، وهو فريد وأملس بما فيه الكفاية.

دعنا نعرض شبكة متساوية البعد $\overline{Q}_{h\tau} = \{(x_i, t_j) \in \overline{Q}\}$ بالخطوتين h و τ على طول الاتجاهين O_x و O_t على التوالي في المستطيل $\overline{Q} = \{0 \le x \le d,\, 0 \le t \le T\}$.

لتكن $(x_i, \; t_j)$ نقطة ثابتة للشبكة داخل المستطيل Q. الآن نكتب معادلة الانتشار عند هذه النقطة

$$\frac{\partial u(x_i, t_i)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 u(x_i, t_j)}{\partial x^2}. \qquad (٦)$$

التعبيرات

$$\frac{\partial u(x_i, t_i)}{\partial t} = \frac{u(x_i, t_{j+1}) - u(x_i, t_j)}{\tau} - \frac{\tau}{2} \frac{\partial^2 u(x_i, \bar{t}_j)}{\partial t^2}, \qquad (٧)$$

حيث إن $\bar{t}_j \in [t_j, t_{j+1}]$ و

$$\frac{\partial^2 u(x_i, t_i)}{\partial x^2} = \frac{u(x_{i+1}, t_j) - 2u(x_i, t_j) + u(x_{i-1}, t_j)}{h^2} - \frac{h^2}{12} \frac{\partial^4 u(\bar{x})}{\partial x^4}, \qquad (٨)$$

حيث إن $\bar{x} \in [x_{i-1}, x_{i+1}]$ تكون صحيحة.

يمكن تحقيق صحة المساوتين الأخيرتين من خلال استخدام متسلسلة صيغة تايلور إلى مشتقات الرتبة الثانية فيما يتعلق بـ t ، وإلى مشتقات الرتبة الرابعة فيما يتعلق بـ x

$$u(x_i,t_{j+1})=u(x_i,t_j+\tau)=u(x_i,t_j)+\tau\frac{\partial u(x_i,t_j)}{\partial t}+\frac{\tau^2}{2}\frac{\partial^2 u(x_i,\hat{t}_j)}{\partial t^2},$$

حيث إن $\hat{t}_j\in[t_j,t_{j+1}]$ و

$$u(x_{i+1},t_j)=u(x_i+h,t_j)=u(x_i,t_j)+h\frac{\partial u(x_i,t_j)}{\partial x}+\frac{h^2}{2}\frac{\partial^2 u(x_i,t_j)}{\partial x^2}$$
$$+\frac{h^3}{6}\frac{\partial^3 u(x_i,t_j)}{\partial x^3}+\frac{h^4}{24}\frac{\partial^4 u(\overline{x}_i,t_j)}{\partial x^4},$$
$$u(x_{i-1},t_j)=u(x_i-h,t_j)=u(x_i,t_j)-h\frac{\partial u(x_i,t_j)}{\partial x}+\frac{h^2}{2}\frac{\partial^2 u(x_i,t_j)}{\partial x^2}$$
$$-\frac{h^3}{6}\frac{\partial^3 u(x_i,t_j)}{\partial x^3}+\frac{h^4}{24}\frac{\partial^4 u(\hat{x}_i,t_j)}{\partial x^4},$$

حيث إن $\overline{x}\in[x_i,x_{i+1}]$ و $\hat{x}\in[x_{i-1},x_i]$. يتم تتبع إثبات (٧) و (٨) باستخدام صيغتي تايلور الأخيرتين. الآن يتم تغيير المشتقات الجزئية من قبل (٧) و(٨)، ويمكن كتابة المعادلة (٦) كالتالي

$$\frac{u(x_i,t_{j+1})-u(x_i,t_j)}{\tau}=D\frac{u(x_{i+1},t_j)-2u(x_i,t_j)+u(x_{i-1},t_j)}{h^2}+\Phi(x_i,t_j), \quad (٩)$$
$$i=1,2,\cdots,n-1,\quad j=0,1,\cdots,m-1,$$

حيث إن

$$\Phi(x_i,t_j)=\frac{\tau}{2}\frac{\partial^2 u(x_i,\bar{t}_j)}{\partial t^2}-D\frac{h^2}{12}\frac{\partial^4 u(\overline{x},t_j)}{\partial x^4},$$

يتم أخذ القيمة $\Phi(x_i,t_j)$ كخطأ التقريب لمعادلة الانتشار (٦). إذا، على سبيل المثال، كانت المشتقات الجزئية للدالة $u(x,t)$ تستوفي التفاوت

$$\max\left|\frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial t^2}\right|,\ \max\left|\frac{\partial^4 u(x,t)}{\partial t^4}\right|=c<\infty$$

في المنطقة $\overline{Q}$، من درجة التقريب تساوي $O(\tau+h^2)$ كلما $\tau, h \to 0$. نلاحظ أن خطأ التقريب للمشتقة الأولى هو $O(\tau)$، وأن خطأ التقريب للمشتقة الثانية $\partial^2 u(x_i,t_j)/\partial x^2$ هو $O(h^2)$.

يمكن إهمال خطأ التقريب $\Phi(x_i,t_j)$ في المعادلة (٩) إذا كانتا τ و h صغيرتين بما فيه الكفاية. في هذه الحالة لدينا المساواة التقريبية

$$\frac{u(x_i,t_{j+1})-u(x_i,t_j)}{\tau} \approx D\frac{u(x_{i+1},t_j)-2u(x_i,t_j)+u(x_{i-1},t_j)}{h^2}.$$

الآن نقدم الدالة الجديدة v_i^j، المعرفة على نقاط الشبكة (x_i, t_j)، وأيضاً المساواة الجديدة الدقيقة

$$\frac{v_i^{j+1}-v_i^j}{\tau} = D\frac{v_{i+1}^j-2v_i^j+v_{i-1}^j}{h^2}, \quad i=1,2,\cdots,n-1,\ j=0,1,\cdots,m-1 \qquad (١٠)$$

يتم تغيير الشرط الابتدائي (٤) بواسطة

$$v_i^0=\varphi(x_i) \quad i=1,2,\cdots,n \qquad (١١)$$

والشرط الحدي (٥)

$$v_0^j=\psi_1(t_j),\ v_n^j=\psi_2(t_j), \quad i=1,2,\cdots,m. \qquad (١٢)$$

إن معادلة الفرق (١٠) مع الشروط الابتدائية (١١) والحدية (١٢) تُشكل مخطط الفرق لحل مسألة القيمة الحدية بالنسبة لمعادلة الانتشار (٣)- (٥). يتم استبدال الشروط الحدية والابتدائية بالضبط. إن قيم الحل $u(x_i, t_j)$ للمسألة التفاضلية (٣)- (٥) تنسجم مع القيم v_i^j لحل مخطط الفرق (١٠)- (١٢). فمن السهل ملاحظة أنه إذا كان خطأ التقريب $\Phi(x_i,t_j)\equiv 0$ لكل من $i = 1, 2,\ldots, n\text{-}1$

و $j = 1, 2, \ldots, m\text{-}1$ ، إذن الفرق يكون $z_i^j = u(x_i,t_j) - v_i^j = 0$. إن الفرق z_i^j يسمى خطأ الحل. إذا كان خطأ التقريب $\Phi(x_i,t_j) \approx 0$ ، إذن يمكن للمرء أن يأمل بأن يكون $u(x_i,t_j) \approx v_i^j$.

علاوة على ذلك سوف نستخدم مصطلح نمط لمعادلة الفرق.

تعريف (٣)

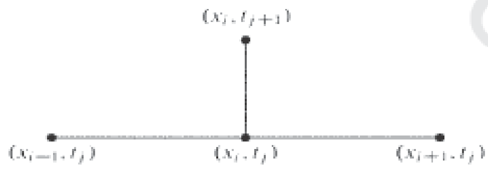
تسمى مجموعة نقاط الشبكة المشتركة في تكوين معادلة الفرق نمط معادلة الفرق. تم استبدال معادلة الانتشار بمعادلة الفرق باستخدام النمط المُكون من أربع نقاط (x_{i-1}, t_j)، (x_i, t_j)، (x_{i+1}, t_j) و (x_i, t_{j+1}) (الشكل رقم ٤). تقع ثلاث نقاط على الخط $t = t_j$ ونقطة واحدة على الخط $t = t_{j+1}$. الآن نقدم تعريفاً لطبقة الشبكة.

تعريف (٤)

تسمى مجموعة نقاط الشبكة الواقعة على الخط $t = t_j$ باسم طبقة الشبكة *j-th*.

طبقة الشبكة *j-th* توحد نقاط (x_i, t_j)؛ عندما تكون $i = 0, 1, \ldots, n$.

الآن نقدم تعريفاً لمعادلة الفرق الصريحة.



الشكل رقم (٤). النمط للمخطط الصريح.

تعريف (٥)

معادلة الفرق تكون صريحة إذا أمكن التعبير عن قيمة الحل على الطبقة العليا بالقيم على الطبقة الدنيا.

معادلة الفرق (١٠) صريحة وثنائية الطبقة، من المعادلة يكـون لـدينا التعبـير v_i^{j+1} بواسطة v_{i+1}^j ، v_i^j ، و v_{i-1}^j

$$v_i^{j+1} = v_i^j + \tau D \frac{v_{i+1}^j - 2v_i^j + v_{i-1}^j}{h^2},$$

الأسئلة ذات الأهمية الملحوظة :

أ) ما هو خطأ الحل $z_i^j = u(x_i, t_j) - v_i^j$ وتقارب مخطط الفرق، وهذا يعني

$$\lim_{h,\tau \to 0} \left| u(x_i, t_j) - v_i^{j+1} \right| = 0 ?$$

ب) كيف نحل مخطط الفرق؟

وسوف نعطي الآن جواباً على السؤال الثاني.

١ , ٣ الحساب لحل The Calculation of a Solution

إن مخطط الفرق الصريح بسيط وله خوارزمية سهلة الحساب والبرمجـة. يـتم تنفيذ حساب مخطط الفـرق (١٠)– (١٢) في طبقـة شـبكة المتسلسـلة واحـدة بعـد الأخرى. في البداية يتم حساب الحل على طبقة الصفر عندما $t = 0$ باستخدام الشرط الابتدائي (١١)

$$v_i^0 = \varphi(x_i) \quad i = 0, 1, \cdots, n,$$

افترض، الحل v_i^j محسـوباً في طبقة *j-th*. وهكـــذا، فإن القيم v_i^j بالنســـبة لـ $i = 0, 1, \ldots, n$ تكون معروفة. نمضي في حل معادلة الفرق (١٠) الخاضعة لقيمة v_i^{j+1} في طبقة *j-th*. لدينا

$$v_i^{j+1} = v_i^j + D\frac{\tau}{h^2}(v_{i+1}^j - 2v_i^j + v_{i-1}^j), \quad i = 1, 2, \cdots, n-1.$$

كل قيم الدالة v_i^j معروفة على الجانب الأيمن من المساواة. لذا يمكن للمرء أن يحسب القيم v_i^{j+1}، و $i = 0, 1,\ldots, n\text{-}1$. يتم حساب القيم v_0^{j+1} و v_n^{j+1} باستخدام شروط حدية (١٢)

$$v_0^{j+1} = \psi_1(t_{j+1}), \qquad v_n^{j+1} = \psi_2(t_{j+1}).$$

علاوة على ذلك، بالقياس سنجد الحل v_i^j على الطبقة التالية وسوف تستمر حتى الطبقة الأخيرة $t = t_m$. ينتهي حساب حل مخطط الفرق الصريح.

٢ ,٣ التقارب والاستقرار The Convergence and the Stability

إن تقارب مخطط الفرق ميزة مهمة جداً لمخطط الفرق. يمكن للمرء أن يطبق مخطط الفرق لغرض عملي فقط إذا كان هذا المخطط متقارباً. سوف نقدم الآن تعريفاً لتقارب مخطط الفرق الصريح (١٠)- (١٢).

تعريف (٦)

يكون مخطط الفرق متقارباً إذا كان

$$\lim_{h,\tau\to 0}\left|u(x_i,t_j) - v_i^j\right| = 0$$

بالنسبة لـ $i = 0, 1, \ldots, n$ و $j = 0, 1, \ldots, m$.

هنا $u(x_i, t_j)$ هو الحل لمسألة القيمة الحدية (٣)- (٥)، و v_i^j هو الحل لمخطط الفرق (١٠)- (١٢) عند النقطة (x_i, t_j).

كما ذكر سابقاً، في هذا الكتاب سوف نقتصر على الحد الأدنى من المعلومات اللازمة على تقارب مخطط الفرق. عرض المفاهيم أدناه هي ذات طابع تكميلي وكافية للدراسة الأساسية ولحل المسائل الرياضية لنظرية الحساس الحيوي.

لإجراء دراسة مفصلة لنظرية مخطط الفرق نشير إلى المرجع [222] والأدبيات المذكورة هناك.

يعتمد تقارب مخطط الفرق على عدة عوامل مثل:

أ) السلاسة لحل المسألة التفاضلية.

ب) الاختيار للشبكة .

ج) الاستقرار لمخطط الفرق.

سوف نناقش الآن هذه العوامل بالتفصيل. تعتمد سلاسة الحل للمسألة التفاضلية كلياً على خواص المعادلة التفاضلية، والشروط الحدية والابتدائية، ومنطقة التعريف. للنماذج الرياضية- قيد الدراسة في هذا الكتاب- حل وللحل عموماً عدد لانهائي من المشتقات فيما يتعلق بالزمن والإحداثيات المكانية. السؤال هو: ما هي القيم العظمى للمشتقات في منطقة الدراسة؟ هذه المسألة معُقدة تماماً ويعتمد الجواب على حالة محددة. من المعروف في الحالة العامة، إذا كانت المنطقة محدبة، فإن القيم العظمى للمشتقات ليست كبيرة جداً. إذا كانت المنطقة غير محدبة، فإن قيم المشتقة قد تكون كبيرة جداً في المناطق المجاورة للزاوية الداخلية. أحادي البعد في حالة الفضاء (الجزء $[0,d]$، (٣)- (٥)) يكون بسيطاً والمشتقات ليست كبيرة جداً. السؤال الذي يطرح نفسه: بأي طريقة تؤثر المشتقات على خطأ حل الفرق؟ إن الإجابة تكمن في تقدير الخطأ لحل مخطط الفرق (١٠)- (١٢)

$$\max_{0\le i\le n,0\le j\le m}\left|z_i^j\right| = \max_{0\le i\le n,0\le j\le m}\left|u(x_i,t_j)-v_i^j\right| \le c\max_{0\le i\le n-1,0\le j\le m-1}\left|\Psi(x_i,t_j)\right|, \quad (١٣)$$

هنا يعتمد الثابت c على طول الجزء d. إن خطأ التقريب

$$\Psi(t_i,t^j)=\frac{\tau}{2}\frac{\partial^2 u(x_i,\bar{t}_j)}{\partial t^2}-D\frac{h^2}{12}\frac{\partial^4 u(\bar{x}_i,\bar{t}_j)}{\partial x^4}, \qquad (١٤)$$

يعتمد على المشتقات الجزئية من حل مسألة القيمة الحدية (٣)- (٥)

$$\frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial t^2},\frac{\partial^4 u(x,t)}{\partial x^4}.$$

تقدير الخطأ (١٣)، والتعبير عن التقريب (١٤) يوضحان الأهمية والمعنى للمشتقات الجزئية لمسألة القيمة الحدية (٣)- (٥).

يوضح تقدير الخطأ (١٣) دور الخطوات للشبكة τ و h. يمكن للمرء أن يلاحظ أنه إذا كان $\tau, h \to 0$، فإن خطأ الحل $\left|u(x_i,t_j)-v_i^j\right| \to 0$ ويتقارب مخطط الفرق.

حتماً سوف يظهر سؤال جديد: متى يتم عمل تقارب مخطط الفرق وما نوع الشروط الواجب استيفائها؟ يعتمد الجواب على مخطط الفرق الملموس أو الحقيقي. سوف نعطي الآن جواباً في حالة وجود مخطط الفرق الصريح (١٠)- (١٢). ينبغي تحقيق الشرط الإضافي

$$D\frac{\tau}{h^2}\le 1/2. \qquad (١٥)$$

تبين أن هناك قيوداً على النسبة بين خطوات الشبكة τ و h. لا يمكن أخذ الخطوات بدون قيد أو شرط. يسمى هذا الشرط: شرط الاستقرار. الاستقرار هو سمة هامة أخرى لمخطط الفرق. إذا لم يتم استيفاء شرط الاستقرار لن يتقارب مخطط الفرق ولا يمكن تطبيقه لحل المسألة التفاضلية. سنعمل الآن على توضيح ما

يكمن في جذر الاستقرار. كما هو مبين سابقاً، تسمح مقدمة مخطط الفرق للمرء أن يحوّل حل المسألة المرتبطة بالمعادلة التفاضلية إلى مسألة جبرية. في هذه الحالة الشرط الحدي والشروط الابتدائية، التي يتم استدعاؤها كافة في تكملة البيانات المدخلة، يتم تحديدها مع خطأ معين. يسبب هذا الإجراء تكون أخطاء التقريب حتمية في عملية الحل العددي. بسبب هذا، فإنه يبدو من الطبيعي أن تتطلب تلك الأخطاء الصغيرة في تحديد مدخلات البيانات وينبغي أن لا تزيد خلال عملية التنفيذ والنتيجة في الاستدلال على خطأ. المخططات التي تنمو فيها الأخطاء الابتدائية خلال عملية الحسابات تبدو غير مستقرة، ومن وجهة نظر التطبيقات الممكنة، لا يمكن العثور على استجابة. يضمن شرط الاستقرار (١٥) بأن خطأ إدخال البيانات وأخطاء التقريب لن تنمو أثناء عملية الحسابات. مخطط الفرق الصريح (١٠)– (١٢) يسمى مخطط الفرق المستقر بشكل مشروط.

٤ – مخطط الفرق الضمني The Implicit Difference Scheme

غالباً ما يطبق مخطط الفرق الضمني لحل المسائل التفاضلية. هذا المخطط يسمى مخطط الفرق الضمني البحت أيضاً. سوف نبدأ بمثال بسيط. عليه سوف نعتبر المسألة الحدية المماثلة لمعادلة الانتشار

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + f(x,t), \qquad (١٦)$$

في مستطيل $Q = \{0 < x < d, 0 < t \le T\}$ بالشرط الابتدائي لـ $t = 0$

$$u(x,0) = \varphi(x), \quad x \in [0, d]. \qquad (١٧)$$

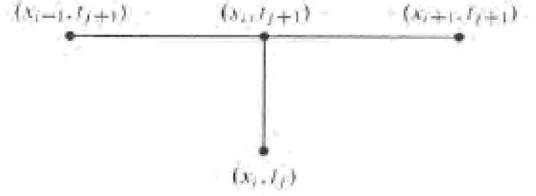
النوع جديد من الشرط الحدي

$$\frac{\partial u(0,t)}{\partial t}=\gamma_0(u(0,t)-u_0),\ \frac{\partial u(d,t)}{\partial x}=\gamma_1(u(d,t)-u_1),\quad t\in[0,T]. \tag{١٨}$$

هنا $f(x,\ t)$ ، $\varphi(x)$ هما الدوال المعطاة، و γ_0، و γ_1، و u_0 و u_1 هم البارامترات المعطاة. يتم استخدام الشرط الحدي لمثل هذا النوع، على سبيل المثال، عندما تكون هناك تدفقات خلال الحد ومعدل التدفق du/dx يتناسب مع فرق التركيز $u - u_0$ الداخل والخارج. المعنى الفيزيقي للدالة $f(x, t)$ هو مصدر.

سوف نستخدم الآن تقنيات مخطط الفرق من أجل حل المسألة (٣)– (٥) إلى (١٦)– (١٨). دعنا نقدم شبكة $\overline{Q}_{h\tau}=\{(x_i,t_j)\in\overline{Q}=\{0\le x\le d,0\le t\le T\}\}$ بالخطوتين h و τ على الاتجاهين Ox و Ot على التوالي. بطريقة مشابهة يمكن استبدال مسألة القيمة الحدية الابتدائية لمعادلة الانتشار بمعادلة الفرق باستخدام نمط مكون من أربع نقاط (x_{i-1}, t_{j+1})، (x_i, t_{j+1})، (x_{i+1}, t_{j+1}) و (x_i, t_j) (الشكل رقم ٥). وهكذا، يتم تحويل المعادلة التفاضلية (١٦) إلى معادلة الفرق التالية

$$\frac{v_i^{j+1}-v_i^j}{\tau}=D\frac{v_{i+1}^{j+1}-2v_i^{j+1}+v_{i-1}^{j+1}}{h^2}+f(x_i,t_j), \tag{١٩}$$
$$i=1, 2, \ldots, n\text{-}1,\quad j=0, 1, \ldots, m\text{-}1.$$



الشكل رقم (٥). نمط المخطط الضمني.

يتم تغيير الشروط الحدية والابتدائية بواسطة:

$$v_i^0 = \varphi(x_i), \quad i = 0,1,\ldots,n. \tag{٢٠}$$

و

$$\frac{v_1^j - v_0^j}{h} = \gamma_0 (v_0^j - u_0), \; \frac{v_n^j - v_{n-1}^j}{h} = \gamma_1 (v_n^j - u_1), \quad j = 1,2,\ldots,m. \tag{٢١}$$

إن معادلة الفرق ضمنية وثنائية الطبقة. فمن السهل أن تظهر (على غرار معادلة الفرق الصريحة (١٠)) أن خطأ التقريب لمعادلة الفرق (١٩) هو $O(\tau + h^2)$، والشرط الابتدائي (١٧) يتم تقريبه تماماً بالمعادلة (٢٠) وخطأ التقريب للشرط الحدي (١٨) هو $O(h)$. سوف نثبت فقط العبارة الأخيرة. سنعتبر شرط حد الجانب الأيسر

$$\frac{\partial u(0,t)}{\partial x} = \gamma_0 (u(0,t) - u_0),$$

والشرط الحدي للفرق المناظر

$$\frac{v_1^j - v_0^j}{h} = \gamma_0 (v_0^j - u_0).$$

نطور $u(x)$ التالية في المتسلسلة بصيغة تايلور حتى مشتقات من الرتبة الثانية

$$u(x_1, t_j) = u(x_0 + h, t_j) = u(x_0, t_j) + h \frac{\partial u(x_0, t_j)}{\partial x} + \frac{h^2}{2} \frac{\partial^2 u(x_0, t_j)}{\partial x^2} + O(h^3).$$

إن هذا يُنتج

$$\frac{u(x_1, t_j) - u(x_0, t_j)}{h} = \gamma_0 (u(x_0, t_j) - u_0) + \frac{h}{2} \frac{\partial^2 u(x_0, t_j)}{\partial x^2} + O(h^2)$$

عندما يتم استبدال القيمتين v_1^j و v_0^j في شـرط حد فرق الجانب الأيـســر المعادلـة (٢١) بالقيم من حل المسألة (١٦)– (١٨) $u(x_1, t_j)$ و $u(x_0, t_j)$ على التوالي. فمن هذه المساواة يتبع خطأ تقريب الشـرط الحدي الرتبة $O(h)$ إذا كان

$$\max\left|\frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2}\right| \le c < \infty, \quad (x,t)\in \overline{Q}.$$

بطريقة مماثلة نستطيع أن نثبت خطأ التقريب لشرط حـد الجانـب الأيمـن في المعادلة (١٨) بالمعادلة (٢١).

١ , ٤ التقارب والاستقرار The Convergence and The Stability

إن مخطط الفرق الضمني (١٩)– (٢١) مستقر دون قيد أو شرط. قد تبين أنه لا توجد أية قيود على النسبة بين خطوات الشبكة τ و h. يمكن أخذ الخطوات بدون أي قيود. إنها ميزة هامة جداً ومفيدة لمخطط الفرق الضمني.

يتقارب مخطـط الفرق (١٩)– (٢١) وخطـــأ حل الفـــرق مـن الرتبـــة $O(\tau + h)$.

٢ , ٤ الحساب لحل The Calculation of a Solution

يتم تنفيذ حساب حل مخطط الفرق (١٩)– (٢١) في طبقة الشبكة المتسلسلة واحدة بعد الأخرى. في بادئ الأمر يتم حساب الحل عـلى الطبقـة صـفر عنـد $t = 0$ باستخدام الشرط الابتدائي (٢٠)

$$v_i^0 = \varphi(x_i), \quad i = 0,1,\ldots,n$$

الآن، لنجعل الحل يكون محسوباً عنـد الطبقـة j - th . لـذلك فـإن القـيم v_i^j بالنسبة لـ $i = 0, 1, \ldots, n$ تكـون معروفـة. نمـضــي في حـل معادلـة الفـرق (١٩)

خاضعة لقيمة v_i^{j+1} عند الطبقة $j+1$ - th. معاملات معادلة الفرق (١٩) تتجه إلى ما لا نهاية إذا كانت h، $\tau \to 0$. يمكن أن تسبب هذه صعوبات كبيرة في الحساب؛ لهذا السبب يتم ضرب معادلات الفرق ببعض البارامترات من أجل اختزال قيم المعاملات. دعنا نضرب المعادلة (١٩) بخطوة الشبكة τ. لدينا معادلة الفرق للطبقة $j+1-th$

$$\frac{\tau D}{h^2}v_{i+1}^{j+1}-\left(1+\frac{2\tau D}{h^2}\right)v_i^{j+1}+\frac{\tau D}{h^2}v_{i-1}^{j+1}=-\tau f(x_i,t_j), \tag{٢٢}$$

$$i=1,2,\ldots,n-1.$$

دعنا نضرب الشروط الحدية والابتدائية (٢١) بخطوة الشبكة h (من أجل تقليل المعاملات). هذا يُنتج التالي

$$v_1^{j+1}-(1+h\gamma_0)v_0^{j+1}=-h\gamma_0u_0, \quad v_n^{j+1}(1-h\gamma_1)-v_{n-1}^{j+1}=-h\gamma_1u_1. \tag{٢٣}$$

إن معادلة الفرق (٢٢) مع الشرط الحديين (٢٣) تتضمن مجموعة المعادلات الخطية $n+1$ مع القيم المجهولة $n+1$

$$v_i^{j+1}, \quad i=0,1,\ldots,n.$$

دعنا نقدم الترميزات الجديدة

$$s_i=v_i^{j+1}, \quad i=0,1,\ldots,n.$$

$$a_i=b_i\frac{\tau D}{h^2},\ c_i=1+\frac{2\tau D}{h^2},\ \bar{f}_i=-\tau f(x_i,t_j),\ i=1,2,\ldots,n-1,$$

$$\beta_1=\frac{1}{1+h\gamma_0},\ \beta_2=\frac{1}{1-h\gamma_1},\ \mu_1=\frac{h\gamma_0u_0}{1+h\gamma_0},\ \mu_2=\frac{h\gamma_1u_1}{h\gamma_1-1}$$

إذا كانت $1-h\gamma_1 \neq 0$ و $1+h\gamma_1 \neq 0$. في تكملة المجموعة (٢٢)، و (٢٣) تشتق الصورة

$$a_i s_{i-1} - c_i s_i + b_i s_{i+1} = \bar{f}_i \;,\quad i = 1,2,\ldots,n-1, \tag{٢٤}$$

$$s_0 = \beta_1 s_1 + \mu_1, \tag{٢٥}$$

$$s_n = \beta_2 s_{n-1} + \mu_2. \tag{٢٦}$$

الآن نُعيد كتابة هـذه المجموعـة في الشـكل الاتجـاهي. لهـذا الغـرض نقـدم مصفوفة C ،والمتجهات **S** و **F** كالتالي

$$C = \begin{pmatrix} 1 & -\beta_1 & 0 & \ldots & 0 & 0 & 0 & \ldots & 0 & 0 & 0 \\ a_1 & -c_1 & b_1 & \ldots & 0 & 0 & 0 & \ldots & 0 & 0 & 0 \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ 0 & 0 & 0 & \ldots & a_i & -c_i & b_i & \ldots & 0 & 0 & 0 \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ 0 & 0 & 0 & \ldots & 0 & 0 & 0 & \ldots & a_{n-1} & -c_{n-1} & b_{n-1} \\ 0 & 0 & 0 & \ldots & 0 & 0 & 0 & \ldots & 0 & -\beta_2 & 1 \end{pmatrix},$$

$$\mathrm{S} = \begin{pmatrix} s_0 \\ s_1 \\ \vdots \\ s_i \\ \vdots \\ s_{n-1} \\ s_n \end{pmatrix},$$

$$\mathrm{F} = \begin{pmatrix} \mu_1 \\ \bar{f}_1 \\ \vdots \\ \bar{f}_i \\ \vdots \\ \bar{f}_{n-1} \\ \mu_2 \end{pmatrix},$$

بمساعدة هذه الرموز نحصل على التالي

$$C\mathrm{S} = \mathrm{F}. \qquad (٢٧)$$

يمكن للمرء أن يلاحظ أن الصفوف الأولى والأخيرة من المصفوفة C تتكون من معاملين غير الصفر والصفوف الباقية من ثلاثة معاملات غير الصفر، ومجموعة المعادلات الخطية تكون بمصفوفة ثلاثية قطرية. الخطوة التالية هي إحصاء القيم s_i أو v_i^{j+1}. كما يمكن للمرء أن يلاحظ بسهولة، أن حل مخطط الفرق الضمني يمكن اختزاله إلى صف من مجموعات المعادلات الخطية من نوع خاص. نحصل على مجموعة المعادلات الخطية لكل طبقة، بدءاً من الطبقة الأولى لـ $j = 1$. قد تبين أنه من الممكن استخدام هذه الميزة لتطبيق طريقة اقتصادية خاصة لحل هذه المجموعة. تعني الطريقة الاقتصادية أن الوقت التي تتطلبه هو أقل وقت تنفيذ لإعطاء حل لمجموعة المعادلات الخطية. ينتمي متغير variant تدفق طريقة الحذف إلى الطرق الاقتصادية. يجدر التأكيد على أن عدد العمليات الحسابية، وهو أمر ضروري لحل هذه المجموعة، الذي يتناسب مع عدد القيم المجهولة. هكذا يمكننا التنبؤ، أنه لحل مسألة القيمة الحدية يتم تطبيق مخطط الفرق الضمني، وعليه لحل مجموعة المعادلات

الخطية المتحصل عليها، فإنه يتم تطبيق متغير تدفق طريقة الحذف، ومن ثم يتناسب عدد العمليات الحسابية، الضروري لحساب القيم v_i^{j+1}، $i = 0, 1, \dots, n$، و $j = 0, 1, \dots, m$ مع عدد القيم المجهولة $(n + 1)(m + 1)$. الآن سوف نواصل حل مخطط الفرق عن طريق تطوير متغير تدفق طريقة الحذف.

٥- طريقة الحذف لمجموعة المعادلات الخطية

The Elimination Method for the System of Linear Equations

يتم تكريس هذا المقطع لطريقة حذف خاصة (متغير التدفق لطريقة الحذف) من أجل حل مجموعة معادلات خطية بمصفوفات ثلاثية قطرية. قد تم تطوير مجموعة المعادلات الخطية بمصفوفات ثلاثية قطرية عن طريق بناء مخطط الفرق لحل المسائل التفاضلية المختلفة. لقد حصلنا أعلاه على مثل هذه المجموعة لحل مسألة القيمة الحدية بالنسبة لمعادلة الانتشار. سنعتبر الآن مجموعة المعادلات الخطية

$$a_i s_{i-1} - c_i s_i + b_i s_{i+1} = f_i\ ,\quad i = 1,2,\dots,n-1, \tag{٢٨}$$

$$s_0 = \beta_1 s_1 + \mu_1, \tag{٢٩}$$

$$s_n = \beta_2 s_{n-1} + \mu_2. \tag{٣٠}$$

فمن السهل ملاحظة أن للمعادلة الأولى والأخيرة معاملين غير صفريين يخلفان معادلات بثلاثة معاملات غير صفرية ومجموعة المعادلات الخطية بالمصفوفة الثلاثية القطرية.

نتتقل الآن إلى حل المجموعة. سنعمل الآن على حذف القيمة s_0 في المعادلة (٢٨) لـ $i = 1$ بمساعدة المساواة للمعادلة (٢٩). وهكذا

$$(a_1\beta_1 - c_1)s_1 + b_1 s_2 = f_1 - a_1\mu_1.$$

نفترض $a_1\beta_1 - c_1 \neq 0$. وهذا يُنتج المعادلة التالية

$$s_1 = d_2 s_2 + e_2, \qquad (٣١)$$

حيث إن

$$d_2 = \frac{b_1}{c_1 - a_1\beta_1}, \quad e_2 = \frac{a_1\mu_1 - f_1}{c_1 - a_1\beta_1}. \qquad (٣٢)$$

سنفترض العلاقة التكرارية

$$s_{i-1} = d_i s_i + e_i,$$

لتكون صحيحة. الهدف هو الحصول على علاقة جديدة

$$s_i = d_{i+1} s_{i+1} + e_{i+1}, \qquad (٣٣)$$

بالمعاملات غير المحددة d_{i+1} وe_{i+1}. باستبدال

$$s_{i-1} = d_i s_i + e_i,$$

في المعادلة (٢٨) يُنتج التالي

$$(a_i d_i - c_i)s_i + b_i s_{i+1} = f_i - a_i e_i.$$

الذي يؤدي إلى (٣٣) إذا افترضنا أن $a_i d_i - c_i \neq 0$.

من ثم تكون المعاملات

$$d_{i+1} = \frac{b_i}{c_i - d_i a_i}, \qquad (٣٤)$$

$$e_{i+1} = \frac{a_i e_i - f_i}{c_i - d_i a_i}, \ \ i = 2,3, \ldots, n-1 \qquad (٣٥)$$

وهكـــذا، نؤســـس صيغ التكرار لتحديــــد كـــل من d_i و e_i. ننتقل الآن إلى تحديـد الـ s_i.

يتم استخلاص القيمة s_n من مجموعة المعادلات التالية

$$s_n = \beta_2 s_{n-1} + \mu_2,$$

$$s_{n-1} = d_n s_n + e_n$$

تحت القيد $1 - d_n \beta_2 \neq 0$.

لذلك فإن القيمة s_n تساوي

$$s_n = \frac{\mu_2 + \beta_2 e_n}{1 - d_n \beta_2}. \qquad (٣٦)$$

الآن يمكننا حساب القيم s_i، و $i = n-1, n-2, \ldots, 1$ باستخدام

$$s_i = d_{i+1} s_{i+1} + e_{i+1}, \qquad (٣٧)$$

لـ $i = n-1, n-2, \ldots, 1$، والقيمة s_0 من خلال استخدام

$$s_0 = \beta_1 s_1 + \mu_1. \qquad (٣٨)$$

بالمرور من خلال هذه المسألة زمنياً لإيجاد المعاملات بالصيغ (٣٢)، (٣٤)، (٣٥) d_i و e_i يسمى مسار الحذف الأمامي، ولإيجاد القيم s_i بالصيغ (٣٦)– (٣٨) يسمى مسار الحذف الخلفي.

إن الخوارزمية الواردة أدناه تسمى طريقة الحذف الأيمن وتوضح المدخل للحالة العامة:

$$\overrightarrow{d_{i+1}} = \frac{b_i}{c_i - d_i a_i}, \quad \overrightarrow{e_{i+1}} = \frac{a_i e_i - f_i}{c_i - d_i a_i}, \quad i = 2,3,..,n-1,$$

$$s_n = \frac{\mu_2 + \beta_2 e_n}{1 - d_n \beta_2},$$

$$\overleftarrow{s_i} = d_{i+1} s_{i+1} + e_{i+1}, \quad i = n-1, n-2,..,1,$$

$$s_0 = \beta_1 s_1 + \mu_1.$$

هنا تُشير الرموز (←) و (→) إلى اتجاهات إحصاء الدليل: إما من i إلى $i+1$ وإما من $i+1$ إلى i.

يمكن تطبيق طريقة متغير التدفق لحل مخطط الفرق الضمني (١٩)– (٢١) لإحصاء في كل طبقة ابتداءً من $j = 1$ حتى $j = m$. لقد تم تحويل المخطط (١٩)– (٢١) إلى مجموعة المعادلات الخطية (٢٤)– (٢٦) بمصفوفات ثلاثية قطرية. يتم حل هذه المجموعة بمتغير التدفق. وبناءً على ذلك، يتم تقديم طريقة الحل للمخطط الفرق الضمني (١٩)– (٢١) إجمالاً.

١ , ٥ استقرار طريقة الحذف Stability of the Elimination Method

الآن سوف نناقش مسألة تأثير أخطاء المعاملات a_i، b_i، c_i و β_i على خطأ الحل s_i. استقرار الطريقة لحل مجموعة المعادلات الخطية يعني أن خطأ المعاملات a_i، b_i، c_i و β_i جنباً إلى جنب مع حساب خطأ التناقص الدوري، من الناحية العملية لا يؤثر على النتيجة النهائية. إذا كانت الطريقة لحل مجموعة المعادلات الخطية غير مستقرة، فإنها تعني أن خطأ المعاملات a_i، b_i، c_i و β_i جنباً إلى جنب مع حساب خطأ التناقص الدوري، سيكون تأثيرها كبيراً على النتيجة النهائية، والقيم s_i يمكن أن تكون مختلفة كثيراً عن الحل المضبوط. سنعطي فقط شرطاً كافياً لتحقيق استقرار طريقة

الحذف دون برهان. تتضمن الممارسة الشائعة شروطاً كافية

$$|c_i| \geq |a_i| + |b_i|, \ \ i = 1,2,....,n-1,$$
$$|\beta_k| \leq 1, \ \ k = 1,2, \quad |\beta_1| + |\beta_2| < 2.$$

مخططات الفرق، قيد الدراسة في هذا الكتاب، تولد الأنظمة الخطية، التي تستوفي الشروط الكافية.

٦ – مخطط فرق كرانك– نيكلسون The Crank – Nicolson Difference Scheme

مخطط فرق كرانك– نيكلسون هو من بين أكثر طرق الفرق الصالحة للاستعمال. سوف نفحص مثال لمسألة القيمة الحدية لمعادلة الانتشار. بذلك، سوف نعتبر مسألة القيمة الحدية

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \tag{٣٩}$$

في مستطيل $Q = \{0 < x < d, \ 0 < t \leq T\}$ بالشرط الابتدائي $t = 0$.

$$u(x,0) = \varphi(x), \quad x \in [0,d], \tag{٤٠}$$

ونوع جديد للشرط الحدي

$$\frac{\partial u(0,t)}{\partial x} = 0, \ \ u(d,t) = \psi(t), \ \ t \in [0,T]. \tag{٤١}$$

هنا $\varphi(x)$ و $\psi(t)$ دوال معطاة. الشروط الحدية لمثل هذا النوع يتم استخدامها، على سبيل المثال، عندما لا يكون هناك تدفق خلال الحد $x = 0$، والتركيز $u(d,t)$، فإنه معطى عند الحد الآخر $x = d$ ويساوي $\psi(t)$ لكل لحظة من الزمن t.

الآن سنقوم بتطبيق تقنية مخطط الفرق المطور في وقت سابق لحل المسألة (٣٩)– (٤١). دعنا نُقدم شبكة $\overline{Q}_{h\tau}=\{(x_i,t_j)\in\overline{Q}\}$ بخطوات h و τ على طول الاتجاهين Ox و Ot، على التوالي في المستطيل $\overline{Q}=\{0\le x\le d,\ 0\le t\le T\}$.

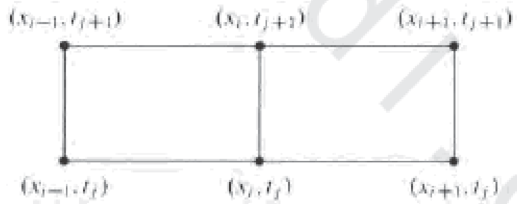
بطريقة مشابهة يمكن استبدال مسألة القيمة الحدية لمعادلة الانتشار بمعادلة الفرق باستخدام نمط يتكون من ست نقاط شبكية.

$(x_{i-1}, t_j), (x_i, t_j), (x_{i+1}, t_j), (x_{i-1}, t_{j+1}), (x_i, t_{j+1}), (x_{i+1}, t_{j+1})$

(الشكل رقم ٦). يتم استبدال معادلة الانتشار (٣٩) بمعادلة الفرق

$$\frac{v_i^{j+1}-v_i^j}{\tau}=\frac{D}{2}\left(\frac{v_{i+1}^{j+1}-2v_i^{j+1}+v_{i-1}^{j+1}}{h^2}+\frac{v_{i+1}^j-2v_i^j+v_{i-1}^j}{h^2}\right), \tag{٤٢}$$

$$i=1,2,...,n-1,\quad j=0,1,...,m-1.$$



الشكل رقم (٦). نموذج مخطط الفرق كرانك– نيكلسون.

يتم تغيير الشرط الابتدائي (٤٠) بـ

$$v_i^0=\varphi(x_i),\ i=0,1,...,n \tag{٤٣}$$

والشروط الحدية (٤١)

$$\frac{v_1^j-v_0^j}{h}=0,\quad v_n^j=\psi(t_j),\quad j=1,2,....,m. \tag{٤٤}$$

مخطط الفرق (٤٢)– (٤٤) ضمني وثنائي الطبقة.

من السهل تبين أن معادلة الفرق (٤٢) تُقدم تقريباً لمعادلة الانتشار (٣٩) من الرتبة $O(\tau^2 + h^2)$ إذا كانت المشتقات الجزئية للدالة $u(t, x)$ تحقق المتباينات.

$$\max\left|\frac{\partial^3 u(x,t)}{\partial t^3}\right|,\ \max\left|\frac{\partial^4 u(x,t)}{\partial x^4}\right| = c < \infty$$

في المنطقة $\overline{Q}$. يتم تقريب الشرط الابتدائي (٤٠) بالمعادلة (٤٣) تماماً وخطأ التقريب للشرط الحدي (٤٤) هو $O(h)$ (بشكل مماثل كما لـ (١٨)، (٢١)).

١, ٦ الحساب لحل The Calculation of a Solution

طريقة الحساب مشابهة جداً لتلك الموجودة في مخطط الفرق الضمني (١٩)– (٢١). يتم تنفيذ حساب مخطط فرق كرانك– نيكلسون (٤٢)– (٤٤) في طبقة شبكة متسلسلة واحدة تلو الأخرى. في البداية يتم حساب الحل على الطبقة صفر عند $t = 0$ باستخدام الشرط الابتدائي (٤٣)

$$v_i^0 = \varphi(x_i), \quad i = 0,1,\ldots,n$$

الآن، نفترض، أنه يتم حساب الحل v_i^j في الطبقة $j - th$. لذا، فإن القيم v_i^j لـ $i = 0, 1, \ldots, n$ معروفة. نمضي في حل معادلة الفرق (٤٢) الخاضعة لقيمة v_i^{j+1} في طبقة $j - th$. تتجه معاملات معادلة الفرق (٤٢)، والشرط الحدي في الجانب الأيسر (٤٤) إلى ما لا نهاية إذا كانت h، $\tau\to 0$. هذه يمكن أن تسبب صعوبات كبيرة في الحساب. لهذا السبب يتم ضرب معادلات الفرق بخطوة الشبكة τ، والشرط الحدي بخطوة الشبكة h. هذا يُنتج

$$v_i^{j+1} = v_i^j + \frac{\tau D}{2}\left(\frac{v_{i+1}^{j+1} - 2v_i^{j+1} + v_{i-1}^{j+1}}{h^2} + \frac{v_{i+1}^j - 2v_i^j + v_{i-1}^j}{h^2}\right), \quad (٤٥)$$

$$i = 1, 2, \ldots, n-1,$$

والشـرط الحدي للطبقة $j+1-th$

$$v_0^{j+1} = v_1^{j+1}, \quad v_n^{j+1} = \psi(t_{j+1}), \quad j = 1, 2, \ldots, m-1. \quad (٤٦)$$

معادلة الفرق والشرط الحدي جنباً إلى جنب يؤسسـان مجموعـة المعـادلات الخطية $n+1$ مع قيم مجهولة $n+1$.

$$v_i^{j+1}, \quad i = 0, 1, \ldots, n$$

دعنا نُعيد كتابة هذه المجموعة في شكل مناسب لإيجاد الحـل بمتغير تـدفق طريقة الحذف. لهذا الغرض نقدم الترميزات التالية

$$s_i = v_i^{j+1}, \qquad i = 0, 1, \ldots, n,$$

$$a_i = b_i = \frac{\tau D}{2h^2}, \quad c_i = 1 + \frac{\tau D}{h^2}, \quad i = 1, 2, \ldots, n-1,$$

$$\beta_1 = 1, \quad \beta_2 = 0, \quad \mu_1 = 0, \quad \mu_2 = \psi(t_{j+1}),$$

$$f_i = -v_i^j\left(1 - \frac{\tau D}{h^2}\right) - \frac{\tau D}{2h^2}\left(v_{i+1}^j + v_{i-1}^j\right),$$

$$i = 1, 2, \ldots, n-1.$$

بمساعدة هذه الترميزات تأخذ مجموعة المعادلات الخطية (٤٥)، (٤٦) الشكل

$$s_0 = \beta_1 s_1 + \mu_1, \quad (٤٧)$$

$$a_i s_{i-1} - c_i s_i + b_i s_{i+1} = f_i, \quad i = 1, 2, \ldots, n-1, \quad (٤٨)$$

$$s_m = \beta_2 s_{m-1} + \mu_2. \tag{٤٩}$$

إن المعادلتين الأولى والأخيرة تتكونان من قيمتين مجهولتين، وللمعادلات المتبقية ثلاث قيم مجهولة. نتيجة لذلك، تكون مجموعة المعادلات الخطية بمصفوفة ثلاثية قطرية

$$B = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ a_1 & -c_1 & b_1 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & a_i & -c_i & b_i & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & a_{n-1} & -c_{n-1} & b_{n-1} \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

الآن يمكن تطبيق طريقة متغير التدفق لحل المجموعة (٤٢)- (٤٤) وكذلك لحسابات القيم $s_i = v_i^{j+1}$ لـ $i = 0, 1, \dots, n$. لقد انتهى الإحصاء أو العد لحل الفرق على الطبقة $j - th$، سوف نستمر بطريقة مماثلة حتى نصل إلى الطبقة الأخيرة $n - th$، وبذلك تنتهى طريقة حل مخطط فرق كرانك- نيكلسون.

٦,٢ التقارب والاستقرار The Convergence and the Stability

مخطط فرق كرانك- نيكلسون (٤٢)- (٤٤) مستقر دون قيدٍ أو شرطٍ. وقد تبين أنه لا يوجد أي قيد على النسبة بين خطوات الشبكة τ و h. يمكن اتخاذ الخطوات دون أي قيود. هي ميزة مفيدة ومهمة جداً لمخطط فرق كرانك- نيكلسون.

يتقارب مخطط الفرق (٤٢)- (٤٤) ويكون خطأ حل الفرق من الرتبة $O(\tau^2 + h^2)$.

٧ -مخطط الفرق مع الأوزان The Difference Scheme with the Weights

إن مخطط الفرق بالأوزان هو شكل عام للمخططات السابقة، تم تطبيقه على معادلة الانتشار. مخطط بمعادلة الفرق ثنائي الطبقة.

هنا سوف نناقش فقط مسألة الاستبدال لمعادلة الانتشار ولن نعتبر مسألة التقريب للشروط الحدية الابتدائية. سوف نستخدم نموذجاً يحتوي على ست نقاط شبكية:

$$(x_{i-1}, t_j), (x_i, t_j), (x_{i+1}, t_j), (x_{i-1}, t_{j+1}), (x_i, t_{j+1}), (x_{i+1}, t_{j+1}).$$

يتم استبدال معادلة الانتشار

$$\frac{\partial u(x_i, t_j)}{\partial t} = D\frac{\partial^2 u(x_i, t_j)}{\partial x^2},$$

بمعادلة الفرق ولها الشكل

$$\frac{v_i^{j+1} - v_i^j}{\tau} = \sigma\frac{v_{i+1}^{j+1} - 2v_i^{j+1} + v_{i-1}^{j+1}}{h^2} + (1-\sigma)\frac{v_{i+1}^j - 2v_i^j + v_{i-1}^j}{h^2},$$

$$i = 1, 2, \ldots, n-1, \quad j = 0, 1, \ldots, m-1,$$

حيث إن σ بارامتر حقيقي اختياري arbitrary real parameter.

يتم تحويل معادلة الفرق إلى معادلة فرق صريحة إذا كانت $\sigma = 0$، وإلى معادلة فرق ضمنية بحتة إذا كانت $\sigma = 1$، وإلى معادلة فرق ضمنية إذا كانت $\sigma \neq 0$، وإلى معادلة فرق كرانك- نيكلسون إذا كانت $\sigma = 1/2$.

بطريقــة مشابهة يمكن للمــرء ملاحظة أن خطأ التقريب يكون $O(\tau^2+h^2)$ لـ $\sigma=1/2$ إذا كانت المشتقات الجزئية للدالة $u(t,x)$ تحقق المتباينات

$$max\left|\frac{\partial^3 u(x,t)}{\partial t^3}\right|,\ max\left|\frac{\partial^4 u(x,t)}{\partial x^4}\right| = c < \infty,$$

وخطأ التقريب هو $O(\tau^2+h^2)$ لـ $\sigma=1/2$ إذا كانـت المشـتقات الجزئيـة للدالـة $u(t,x)$ تحقق المتباينات

$$\max\left|\frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial t^2}\right|\ \ \max\left|\frac{\partial^4 u(x,t)}{\partial x^4}\right| = c < \infty$$

في منطقة الفحص.

كما حدث في الحالات السـابقة لابـد مـن إضـافة الشرـوط الحديـة والابتدائيـة لاستكمال مخطط الفرق. إجراء عملية حسابية مشابهة جـداً لتلـك الموجـودة في مخطـط الفرق الضمني البحت أو في مخططات فـرق كرانـك- نيكلسـون. يـتم تنفيـذ العمليـة الحسابية لمخطط الفرق بالأوزان في طبقة شبكة متسلسلة واحدة تلو الأخرى. في البداية يتم حساب الحل على الطبقة صفر عند $t=0$ باستخدام الشــرط الابتدائي. يتم حسـاب الحل على الطبقات التالية بنفس الطريقة فيما يتعلق بنوع الشــروط الحدية.

١, ٧ التقارب والاستقرار The Convergence and the Stability

لمخطط الفرق مع الأوزان شروط الاستقرار التالية:

أ) إذا كانت $\sigma \geq \frac{1}{2}$ فإن المخطط يكون مستقراً لأي τ و h .

ب) إذا كانت $0<\sigma<\frac{1}{2}$، فإن المخطـط يكـون مسـتقراً بشـكل مشــــروط وخطوات الشبكة يجب أن تحقق المتباينة

$$\frac{D\tau}{h^2} \le \frac{1}{2(1-2\sigma)}.$$

قد تبين أنه ليس هناك أي قيـــود على النســـبة بين خطوات الشبكة τ و h لـ

$$\sigma \ge \frac{1}{2}.$$

يمكن اتخاذ الخطوات بدون أي قيود. هي ميزة هامة جـداً ومفيـدة لمخطـط الفرق بالأوزان.

إن مخطط الفرق بالأوزان يتقارب ويعتمـد الخطـأ حـل الفـرق عـلى أخطـاء التقريب لمعادلة الانتشار ، والشروط الحدية والابتدائية.

٨- مخطط فرق كرانك- نيكلسون على شبكة غير متساوية البعد

The Crank – Nicolson Difference Scheme on Non-equidistance Grid

يتناول هذا المقطع مخطط فرق كرانك- نيكلسون على شـبكة غـير متسـاوية البعد. تلعب الشبكة غير متساوية البعـد دوراً هامـاً عنـدما تكـون الأوسـاط غـير متجانسة أو هندسة المساحة قيد الفحص معُقدة. سـنعمل الآن عـلى اعتبـار مسـألة القيمة الحدية

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \qquad (٥٠)$$

في مستطيل $Q=\{0<x<d,\ 0<t\le T\}$ مع الشرط الابتدائي لـ $t=0$.

$$u(x,0)=\varphi(x_1), \qquad x\in[0,d]\ , \qquad (٥١)$$

والشـرط الحدي

$$\frac{\partial u(0,t)}{\partial x}=0,\ \ u(d,t)=\psi(t),\ \ t\in[0,T]. \qquad (٥٢)$$

هنا $\varphi(x)$ و $\psi(t)$ دوال معطاة.

الآن سنقوم بتطبيق تقنية مخطط الفرق المطور في وقت سابق لحل المسألة (٥٠)– (٥٢). دعنا نقدم شبكة غير متساوية البعد $\overline{Q}_{h\tau} = \{(x_i, t_j) \in \overline{Q}\}$ بالخطوات $h_i = x_i - x_{i-1}$ و $\tau_i = t_j - t_{j-1}$ على طول الاتجاهين Ox و Ot، على التوالي في المستطيل $\overline{Q} = \{0 \le x \le d,\ 0 \le t \le T\}$. تعتمد خطوات الشبكة على الحروف التحتية i و j. ينبغي أن تستوفي الخطوات شرطي التعبير $\sum_{i=1}^{n} h_i = d$ و $\sum_{j=1}^{m} \tau_j = T$.

يمكن بطريقة مشابهة استبدال مسألة القيمة الحدية لمعادلة الانتشار بمعادلة فرق باستخدام نموذج يتكون من نقاط الشبكة الست

$$(x_{i-1}, t_j), (x_i, t_j), (x_{i+1}, t_j), (x_{i-1}, t_{j+1}), (x_i, t_{j+1}), (x_{i+1}, t_{j+1}).$$

يتم استبدال معادلة الانتشار (٥٠) بمعادلة الفرق

$$\frac{v_i^{j+1} - v_i^j}{\tau_{j+1}} = \frac{D}{2\hat{h}_i}\left(\frac{v_{i+1}^{j+1} - v_i^{j+1}}{h_i} - \frac{v_i^{j+1} - v_{i-1}^{j+1}}{h_{i-1}} + \frac{v_{i+1}^j - v_i^j}{h_i} - \frac{v_i^j - v_{i-1}^j}{h_{i-1}}\right), \quad (٥٣)$$

$$i = 1, 2, \ldots, n-1, \quad j = 0, 1, \ldots, m-1,$$

حيث إن $\hat{h}_i = (h_i + h_{i-1})/2$.

يتم تغيير الشرط الابتدائي (٥١) بـ

$$v_i^0 = \varphi(x_i), \quad i = 0, 1, \ldots, n, \quad (٥٤)$$

والشروط الحدية (٥٢) بـ

$$\frac{v_1^j - v_0^j}{h_1} = 0, \quad v_n^j = \psi(t_j), \quad j = 1, 2, \ldots, m. \quad (٥٥)$$

إن مخطط الفرق (٥٣)– (٥٥) ضمني وثنائي الطبقة.

من السهل أن ترى أن معادلة الفرق (٥٣) تقدم تقريباً لمعادلة الانتشار (٥٠) من الرتبة $O(\tau_{\max}^2 + h_{\max})$ إذا كانت المشتقات الجزئية من الدالة $u(t, x)$ تحقق المتباينات

$$max\left|\frac{\partial^3 u(x,t)}{\partial t^3}\right|, \quad max\left|\frac{\partial^3 u(x,t)}{\partial x^3}\right| = c < \infty,$$

في المنطقة $\overline{Q}$، حيث إن

$$\tau_{\max} = \max\{\tau_j\,, \quad j = 1,2,\ldots,m\}, \quad h_{\max} = \max\{h_i\,, \quad i = 1,2,\ldots,n\}.$$

الشرط الابتدائي (٥١) مُقرب من قبل (٥٤) تماماً، وخطأ التقريب للشرط الحدي (٥٥) هو $O(h_1)$.

١,٨ الحساب لحل The Calculation of Solution

إن إجراء العملية الحسابية مشابه جداً لتلك الموجودة في مخطط فرق كرانك-نيكلسون (٤٢)- (٤٤). يتم تنفيذ حساب مخطط الفرق (٥٣)- (٥٥) في طبقة شبكة متسلسلة واحدة تلو الأخرى. في البداية يتم حساب الحل على الطبقة صفر عند $t = 0$ باستخدام الشرط الابتدائي (٥٤)

$$v_i^0 = \varphi(x_i), \quad i = 0,1,\ldots,n.$$

الآن، يفترض، أن الحل v_i^j محسوب على الطبقة j - th. وهكذا، فإن القيم v_i^j لـ $i = 0, 1, \ldots, n$ معروفة. نمضي في حل معادلة الفرق (٥٣) الخاضعة لقيمة v_i^{j+1} في الطبقة $j - th$. تتجه معاملات معادلة الفرق (٥٣)، والشرط الحدي في الجانب الأيسر (٥٥) إلى ما لا نهاية إذا كانت h_i، $\tau_j \to 0$. هذه يمكن أن تسبب صعوبات كبيرة في الحساب؛ لهذا السبب يتم ضرب معادلات الفرق بخطوة الشبكة τ_{j+1} ،

والشرط الحدي بخطوة الشبكة h_1. هذا يُنتج التالي

$$v_i^{j+1} = v_i^j + \frac{\tau_{j+1} D}{2\hat{h}_i}\left(\frac{v_{i+1}^{j+1} - v_i^{j+1}}{h_i} - \frac{v_i^{j+1} - v_{i-1}^{j+1}}{h_{i-1}} + \frac{v_{i+1}^j - v_i^j}{h_i} - \frac{v_i^j - v_{i-1}^j}{h_{i-1}}\right), \tag{٥٦}$$

$$i = 1, 2, \ldots, n-1,$$

والشـرط الحدي للطبقة $j+1-th$

$$v_0^{j+1} = v_1^{j+1}, \quad v_n^{j+1} = \psi(t_{j+1}), \quad j = 1,2,\ldots, m-1. \tag{٥٧}$$

معادلة الفرق مع الشرط الحدي جنباً إلى جنب تؤسسان مجموعة المعـادلات الخطيـة $n+1$ بقيم مجهولة $n+1$

$$v_1^{j+1}, \quad i = 0,1,\ldots,n.$$

دعنا نُعيد كتابة هذه المجموعة في شكل مناسب للحل بمتغير تـدفق بطريقـة الحذف. لهذا الغرض نقدم الترميزات التالية

$$s_i = v_i^{j+1}, \quad i = 0,1,\ldots,n,$$

$$a_i = \frac{\tau_{j+1} D}{2\hat{h}_i h_{i-1}}, \; b_i = \frac{\tau_{j+1} D}{2\hat{h}_i h_i},$$

$$c_i = 1 + \frac{\tau_{j+1} D}{h_i h_{i-1}}, \; i = 1,2,\ldots,n-1,$$

$$\beta_1 = 1, \quad \beta_2 = 0, \quad \mu_1 = 0, \quad \mu_2 = \psi(t_j),$$

$$f_i = -v_i^j\left(1 - \frac{\tau_{j+1} D}{h_i h_{i-1}}\right) - b_i v_{i+1}^j - c_i v_{i-1}^j,$$

$$i = 1,2,\ldots,n-1.$$

بمعاونـة هـذه الترميـزات تأخـذ مجموعـة المعـادلات الخطيـة (٥٦)، (٤٦) الشكل التالي

$$s_0 = \beta_1 s_1 + \mu_1, \tag{٥٨}$$

$$a_i s_{i-1} - c_i s_i + b_i s_{i+1} = f_i \ , \quad i = 1,2,\ldots,n-1, \tag{٥٩}$$

$$s_m = \beta_2 s_{m-1} + \mu_2. \tag{٦٠}$$

إن المعادلتين الأولى والأخيرة تتكونان من قيمتـين مجهـولتين، وللمعـادلات الباقية ثلاث قيم مجهولـة؛ ونتيجـة لـذلك، فـإن مجموعـة المعـادلات الخطيـة هـي بالمصفوفة الثلاثية القطرية

$$B = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & \ldots & 0 & 0 & 0 & \ldots & 0 & 0 & 0 \\ a_1 & -c_1 & b_1 & \ldots & 0 & 0 & 0 & \ldots & 0 & 0 & 0 \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ 0 & 0 & 0 & \ldots & a_i & -c_i & b_i & \ldots & 0 & 0 & 0 \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ 0 & 0 & 0 & \ldots & 0 & 0 & 0 & \ldots & a_{n-1} & -c_{n-1} & b_{n-1} \\ 0 & 0 & 0 & \ldots & 0 & 0 & 0 & \ldots & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

الآن يمكن تطبيق طريقة متغير التدفق لحل المجموعة (٤٢)- (٤٤) وكذلك لحسابات القيم $s_i = v_i^{j+1}$ لـ $i = 0, 1, \ldots, n$. لقد انتهـى الإحصـاء لحـل الفـرق عـلى الطبقة $j - th$. سوف نستمر بطريقة مماثلـة حتـى نصـل إلى الطبقـة الأخـيرة $n - th$، بذلك تنتهي طريقة حل مخطط فرق كرانك- نيكلسون.

٢,٨ التقارب والاستقرار The Convergence and the Stability

مخطط فرق كرانك- نيكلسون (٥٣)- (٥٥) مستقر دون قيدٍ أو شرطٍ. قد تبين أنه ليس هناك أي قيود على النسبة بين خطوات الشبكة τ_j و h_i. يمكن اتخاذ الخطوات دون أي قيود. هي ميزة مهمة جداً ومفيدة لمخطط فرق كرانك- نيكلسون.

تتقارب مجموعة الفرق (٥٣)- (٥٥) ويكون خطأ حل الفرق من الرتبة $O(\tau^2 + h)$.

٩- مخطط الفرق الصريح في الإحداثيات الأسطوانية

The Explicit Difference Scheme in the Cylindrical Coordinates

الآن نعتبر معادلة الانتشار في الإحداثيات الأسطوانية. يتم تطبيق الإحداثيات الأسطوانية عندما يكون للمنطقة قيد الفحص شكل أسطواني أو منطقة التحقيق مُقربة بمجموعة من الأسطوانات.

معادلة الانتشار

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2}\right), \qquad (٦١)$$

تأخذ الشكل في الإحداثيات الأسطوانية (r, ϕ, z) .

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial u}{\partial r}\right).$$

في حالة عدم تبعية الحل على z ولا على ϕ، فإن هذا يعني، أنه في حالة التماثل المحوري. وهكذا، فإننا سوف نفحص عملية الانتشار في المنطقة $Q=\{0<r<R,\ 0<t\le T\}$.

مسألة القيمة الحدية لمعادلة الانتشار تأخذ الشكل

$$\frac{\partial u}{\partial t}=D\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial u}{\partial r}\right),\quad (r,t)\in Q, \tag{٦٢}$$

$$u(r,0)=\varphi(r),\quad 0<r\le R, \tag{٦٣}$$

$$\frac{\partial u(0,t)}{\partial r}=0,\ u(R,t)=\psi(t),\quad t\in[0,T]. \tag{٦٤}$$

هنا $\varphi(x)$ و $\psi(t)$ دوال معطاة.

نمضي كالمعتاد وندخل على الجزء $0\le r\le R$ لشبكة متساوية البعد.

$$\overline{Q}_{h,\tau}=\{(r_i,t_j):\quad r_i=ih,\ t_j=j\tau,\ i=0,1,\ldots,n,\ \ j=0,1,\ldots,m$$
$$hn=R,\ m\tau=T\}.$$

ما زال يستخدم إطار هذا القسم، ويمكن الحصول على مخطط الفرق لمسألة القيمة الحدية لمعادلة الانتشار.

يتم تقريب معادلة الانتشار بمعادلة الفرق

$$\frac{v_i^{j+1}-v_i^j}{\tau}=\frac{D}{hr_i}\left(r_{i+1/2}\frac{v_{i+1}^j-v_i^j}{h}-r_{i-1/2}\frac{v_i^j-v_{i-1}^j}{h}\right), \tag{٦٥}$$

$$i=1,2,\ldots,n-1,\quad j=0,1,\ldots,m-1,$$

بالشروط الابتدائية

$$v(r_i,0)=\varphi(r_i),\quad i=0,1,\ldots,n, \tag{٦٦}$$

وشـــروط حدية

$$\frac{v_1^j - v_0^j}{h} = 0, \quad v_n^j = \psi(t_j), \quad j = 1,2,....,m, \qquad (٦٧)$$

حيث إن $r_{i\pm 1/2} = (i \pm 1/2)h$. هذا المخطط صريح وثنائي الطبقة.

بطريقة مشابهة يمكن للمرء ملاحظة أن خطأ التقريب لمعادلة الانتشار (٦٢) بمعادلة الفرق (٦٥) هو $O(\tau + h^2)$ إذا كانت المـشتقات الجزئية للدالة $u(t, x)$ تحقـق المتباينات

$$max\left|\frac{\partial^2 u(r,t)}{\partial t^2}\right|, \quad max\left|\frac{\partial^4 u(r,t)}{\partial r^4}\right| = c < \infty,$$

في المنطقة قيد الفحص. إن خطأ التقريب للشــرط الحدي في الجانب الأيسرـ (٦٤) من قبل (٦٧) هو $O(h)$. خطـأ التقريـب للـشروط الابتدائيـة والحديـة في الجانـب الأيمن (٦٣) يساوي صفراً.

١ , ٩ الحساب لحل The Calculation of a Solution

مخطط الفرق الصــريح (٦٥)- (٦٧) بسيط وذو خوارزمية سهلة للحساب والبرمجة. يتم تنفيذ حساب مخطط الفرق (٦٥)- (٦٧) في طبقـة شـبكة متسلسـلة واحدة تلو الأخرى. في البداية يتم حساب الحل في الطبقة صفر عند $t = 0$ باستخدام الشــرط الابتدائي (٦٦)

$$v_i^0 = \phi(r_i), \quad i = 0,1,,....,n.$$

الآن، يفترض، أن حل v_i^j محسوب في الطبقة $j-th$. لذا، فإن القيم v_i^j لـــ $i =$ 0, 1, …, n تكون معروفة. نمضي في حل مخطط الفـرق (٦٥) الخاضـعة لقيمـة v_i^{j+1} عند $j + 1 - th$. لدينا

$$v_i^{j+1} = v_i^j + \frac{\tau D}{hr_i}\left(r_{i+1/2}\frac{v_{i+1}^j - v_i^j}{h} - r_{i-1/2}\frac{v_i^j - v_{i-1}^j}{h} \right),$$

$$i = 1, 2, \ldots, n-1.$$

كل قيم الدالة v_i^j على الجانب الأيمن من المتساوية معروفة. لذا يمكن للمرء حساب القيـم v_i^{j+1}، و $i = 1, 2, \ldots, n-1$. يـتم حسـاب القـيم v_o^{j+1} و v_n^j باسـتخدام الشروط الحدية (٦٧)

$$v_0^{j+1} = v_1^{j+1}, \qquad v_n^{j+1} = \psi(t_j).$$

بشكل مماثل إضافي سنجد الحل v_i^j على الطبقة التالية ونستمر حتى نصل إلى الطبقة الأخيرة $t = t_m$ وهكذا تنتهي العملية الحسابية لحل مخطط الفرق الصريح.

٢,٩ التقارب والاستقرار The Convergence and Stability

الشـرط التالي لاستقرار مخطط الفرق (٦٥)– (٦٧) .

$$D\frac{\tau}{h^2} \le 1/6. \tag{٦٨}$$

قد تبين أن هناك قيوداً على النسبة بين خطوات الشبكة τ و h.

يتقارب مخطط الفرق (٦٥)– (٦٧) وخطأ حل الفرق هو $O(\tau + h)$.

١٠ - مخطط الفرق كرانك- نيكلسون في الإحداثيات الأسطوانية

The Crank – Nicolson Difference Scheme in the Cylindrical Coordinates

مخطط فرق كرانك- نيكلسون، من بين أكثر طرق الفرق الصالحة للاستخدام في حل مسألة القيمة الحدية لمعادلة الانتشار في الإحداثيات الأسطوانية.

إن الأسباب الرئيسة هي:

لا قيود على النسبة بين خطوات الشبكة τ و h، ويمكن اتخاذ الخطوات بدون أي قيود؛ وهي ميزة هامة جداً ومفيدة لمخطط الفرق كرانك- نيكلسون.

المخطط اقتصادي ويمكن تطبيقه على متغير تدفق طريقة الحذف.

الآن سوف نستمر بتقريب مسألة القيمة الحدية (٦٢)- (٦٤). بطريقة مشابهة يمكن استبدال معادلة الانتشار (٦٢) بمعادلة الفرق التالية

$$\begin{gathered}\frac{v_i^{j+1}-v_i^j}{\tau}=\frac{D}{2r_i}\left(r_{i+1/2}\frac{v_{i+1}^{j+1}-v_i^{j+1}}{h}-r_{i-1/2}\frac{v_i^{j+1}-v_{i-1}^{j+1}}{h}\right.\\ \left.+r_{i+1/2}\frac{v_{i+1}^j-v_i^j}{h}-r_{i-1/2}\frac{v_i^j-v_{i-1}^j}{h}\right)/h,\\ i=1,2,\ldots,n-1,\qquad j=0,1,\ldots,\ m-1.\end{gathered} \qquad (٦٩)$$

يتم تقريب الشروط الابتدائية (٦٣) والحدية (٦٤) بـ(٦٦) و (٦٧). هذا هو مخطط الفرق ضمني وثنائي الطبقة.

بطريقة مماثلة يمكن للمرء أن يلاحظ بأن خطأ التقريب لمعادلة لانتشار (٦٢) بمعادلة الفرق هو $O(\tau^2 + h^2)$ إذا كانت المشتقات الجزئية للدالة $u(t, x)$ تحقق المتباينات

$$max\left|\frac{\partial^3 u(r,t)}{\partial t^3}\right|,\ \ max\left|\frac{\partial^4 u(r,t)}{\partial r^4}\right| = c < \infty,$$

في منطقة الفحص. قد تبين أن خطأ التقريب للشرط الحدي في الجانب الأيسر (٦٧) هو $O(h)$. وخطأ التقريب للشروط الحدية والابتدائية في الجانب الأيمن (٦٧) يساوي صفراً.

١ , ١٠ الحساب لحل The Calculation of a Solution

إن إجراء العملية الحسابية مشابه جداً لتلك في مخطط الفرق الضمني (١٩)-(٢١) ومخطط كرانك- نيكلسون لمعادلة الانتشار في الحالة أحادية البعد (٤٢)-(٤٤). يتم تنفيذ الحساب لمخطط فرق كرانك- نيكلسون (٦٩)، (٦٦)، (٦٧) في طبقة الشبكة المتسلسلة واحدة تلو الأخرى. في البداية يتم حساب الحل على الطبقة صفر عند $t = 0$ باستخدام الشرط الابتدائي (٦٦)

$$v_i^0 = \varphi(r_i) \qquad i = 0, 1, ..., n$$

الآن، ليكن الحل v_i^j محسوباً في الطبقة $j - th$. لذا، فإن القيم v_i^j لـ $i = 0, 1, ..., n$ تكون معروفة. نمضي في حل معادلة الفرق (٦٩) الخاضعة لقيمة v_i^{j+1} في

طبقة $j+1-th$. تتجه معاملات معادلة الفرق والشرط الحدي في الجانب الأيسر (٧١) إلى ما لا نهاية إذا كانت $\tau, h \to 0$. يمكن أن يسبب هذا صعوبات كبيرة في الحساب؛ لهذا السبب يتم ضرب معادلات الفرق بخطوة الشبكة τ والشرط الحدي بخطوة الشبكة h. هذا يُنتج

$$v_i^{j+1} = v_i^j + \frac{\tau D}{2r_i}\left(r_{i+1/2}\frac{v_{i+1}^{j+1} - v_i^{j+1}}{h} - r_{i-1/2}\frac{v_i^{j+1} - v_{i-1}^{j+1}}{h} + r_{i+1/2}\frac{v_{i+1}^{j} - v_i^{j}}{h} - r_{i-1/2}\frac{v_i^{j} - v_{i-1}^{j}}{h}\right)/h, \quad (٧٠)$$

$$i = 1, 2, \ldots, n-1,$$

مع الشـــرط الحدي

$$v_0^{j+1} = v_1^{j+1}, \; v_n^{j+1} = \psi(t_{j+1}). \quad (٧١)$$

إن معادلة الفرق مع الشرط الحدي تؤسسان مجموعة المعادلات الخطية n بالقيم المجهولة n

$$v_i^{j+1}, \qquad i = 0, 1, \ldots, n-1.$$

تتكون معادلة الفرق (٧٠) من ثلاث قيم مجهولة v_{i+1}^{j+1}، v_i^{j+1}، v_{i-1}^{j+1} ومعادلة الشرط الحدي في الجانب الأيسر (٧١) تتكون من القيمتين v_1^{j+1}، v_0^{j+1}. يسمح الشرط الحدي في الجانب الأيمن بحساب قيمة v_n^{j+1} فوراً. في هذه الحالة تكون المجموعة الخطية للمعادلات ثلاثية قطرية.

الخطـوة التاليـة هـي إحصـاء القـيم v_i^{j+1} و $i = 0, 1, .., n - 1$.
ولهذا الهدف نُعيد كتابة مجموعة المعادلات الخطيـة في شـكل جديـد. دعنـا نعـرض الترميزات التالية

$$s_i = v_i^{j+1} \quad i = 0, 1, ..., n-1,$$
$$a_i = \frac{\tau D r_{i-1/2}}{2h^2 r_i},\ \ b_i = \frac{\tau D r_{i+1/2}}{2h^2 r_i},\ \ c_i = 1 + \frac{\tau D}{h^2},\ \ i = 1,2,....,n-2,$$
$$f_i = -\frac{\tau D}{2r_i}\left(r_{i+1/2}\frac{v_{i+1}^j - v_i^j}{h} - r_{i-1/2}\frac{v_i^j - v_{i-1}^j}{h} \right) / h, \quad i = 1,2,..,n-2,$$

$$\beta_1 = 1, \quad \mu_1 = 0,$$
$$\beta_2 = \left(\frac{\tau D r_{n-3/2}}{2r_{n-1}h^2} \right) / \left(1 + \frac{\tau D}{h^2} \right),$$
$$\mu_2 = f_{n-1} / \left(1 + \frac{\tau D}{h^2} \right),$$
$$f_{n-1} = -\frac{\tau D}{2r_{n-1}}\left(r_{n-1/2}\frac{v_n^j - v_{n-1}^j}{h} - r_{n-3/2}\frac{v_{n-1}^j - v_{n-2}^j}{h} + r_{n-1/2}\frac{\psi(t_{j+1})}{h} \right) / h.$$

في التكملة للمجموعة (٧٠)، (٧١) تُشتق الصورة

$$s_1 = \beta_1 s_0 + \mu_1,$$
$$a_i s_{i-1} - c_i s_i + b_i s_{i+1} = f_i, \quad i = 1,2,....,n-2,$$
$$s_{n-1} = \beta_2 s_{n-2} + \mu_2.$$

الآن يمكن تطبيق طريقة متغير التدفق على حل هذه المجموعة من المعادلات الخطية. لذا سيتم حساب القيم

$$v_i^{j+1} = s_i \quad i = 0, 1, \ldots, n-1,$$

بطريقة مماثلة نمضي في الوصول لحل الطبقة التالية $j+2$ وسوف نستمر حتى نصل إلى آخر طبقة $j = m$. بهذا يتم الانتهاء من حساب حل مخطط فرق كرانك- نيكلسون.

٢ , ١٠ التقارب والاستقرار The Convergence and Stability

مخطط فرق كرانك- نيكلسون (٦٩)، (٦٦)، (٦٧) مستقر دون قيدٍ أو شرطٍ. تبين أنه لا يوجد أي قيود على النسبة بين خطوات الشبكة h و τ. يمكن اتخاذ الخطوات بدون أي قيود. هي ميزة مهمة جداً ومفيدة لمخطط فرق كرانك- نيكلسون.

يتقارب مخطط الفرق وخطأ حل الفرق هو $O(\tau + h^2)$.

١١ - معامل الانتشار غير المتصل The Discontinuous Diffusion Coefficient

من الناحية العملية تكون منطقة الفحص غير متجانسة. يرجع ذلك إلى عدم اتصال الأوساط. عادة ما تملك الأوساط المختلفة معاملات انتشار مختلفة. وبناء على ذلك، فإنه من المهم دراسة الأنواع المختلفة لهذه المسألة.

الآن، سوف نقوم بدراسة مسألة القيمة الحدية لمعادلة الانتشار بمعاملات الانتشار غير المتصل (نقطة عدم الاتصال تساوي $x = d_1$)

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \qquad (٧٢)$$

في مستطيل $Q=\{0<x<d,\ 0<t\le T\}$.

بالشـــرط الابتدائي $t=0$

(٧٣) $$u(x,0)=\varphi(x),\quad x\in[0,d],$$

والشـــرط الحدي

(٧٤) $$u(x,0)=\psi_1(t),\quad u(d,t)=\psi_2(t),\quad t\in[0,T].$$

معامل الانتشار يساوي

$$D=\begin{cases}D_1, & if\ \ 0\le x<d_1,\\ D_2, & if\ \ d_1<x\le d.\end{cases}$$

النقطة d_1 هي نقطة عدم الاتصال لمعامل الانتشـار D. حـل المسـائل (٧٢)–(٧٤) يحقق شروط المطابقة

(٧٥) $$u(d_1-0,t)=u(d_1+0,t),\quad t\in[0,T].$$

(٧٦) $$D_1\frac{\partial u(d_1-0,t)}{\partial x}=D_2\frac{\partial u(d_1+0,t)}{\partial x},\ \ t\in[0,T]$$

يتبع شـرط المطابقة الأول من اتصال التركيز u (x, t) ويتبع الثاني من اتصـال التدفق $D\partial u(x,t)/\partial x$. يمكـن الحصـول عـلى الشـــرط (٧٦) باسـتخدام معادلـة التـــوازن. لهذا الغــرض نجري تكامــل المعادلـة (٧٢) في الجـــزء $[d_1-\epsilon, d_1+\epsilon]$، حيث إن $\epsilon>0$ هو عدد صغير، ويترتب على ذلك

$$\int_{d_1-\epsilon}^{d_1+\epsilon}\frac{\partial u(x,t)}{\partial x}dx=\int_{d_1-\epsilon}^{d_1+\epsilon}D\frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2}\,dx,$$

التكامل الأبسط يعطي

$$\int_{d_1-\epsilon}^{d_1+\epsilon} \frac{\partial u(x,t)}{\partial x} dx = D_2 \frac{\partial u(d_1+\epsilon,t)}{\partial x} - D_1 \frac{\partial u(d_1-\epsilon,t)}{\partial x}$$

ومنها عندما تكون $\epsilon \to 0$ فإننا نحصل على شرط المطابقة التالي

$$D_1 \frac{\partial u(d_1-0,t)}{\partial x} = D_2 \frac{\partial u(d_1+0,t)}{\partial x}, \qquad t \in [0,T].$$

يمكن كتابة مسألة القيمة الحدية لمعادلة الانتشار بمعامل انتشـار غير متصل (٧٢)- (٧٤) في صورة أكثر بساطة. هذه الصورة هي الأكثر ملاءمة للحل العددي لأن الجزء $[0, d]$ ينقسم إلى الجزأين $[0, d_1]$ و $[d_1, d]$ بعامل انتشار متصل. بـدلاً مـن دالة واحدة $u\,(x, t)$ نقدم الدالتين $u_1(x, t)$ و $u_2(x, t)$. إن الدالة $u_1(x, t)$ تحقق

$$\frac{\partial u_1}{\partial t} = D_1 \frac{\partial^2 u_1}{\partial x^2}, \tag{٧٧}$$

في مستطيل $Q_1 = \{0 < x < d_1,\ 0 < t \le T\}$.

بالشـــرط الابتدائي عندما $t = 0$

$$u_1(x,0) = \phi(x),\ 0 \le x \le d_1, \tag{٧٨}$$

والشرط الحدي

$$u_1(0,t) = \psi_1(t), \qquad 0 \le x \le T. \tag{٧٩}$$

الدالة $u_2\,(x, t)$ تحقق

$$\frac{\partial u_2}{\partial t} = D_2 \frac{\partial^2 u_2}{\partial x^2}, \tag{٨٠}$$

في مستطيل $Q_2=\{d_1<x<d,\ 0<t\le T\}$.

بالشـرط الابتدائي عندما $t=0$

$$u_2(x,0)=\varphi(x),\ \ d_1\le x\le d, \tag{٨١}$$

والشـرط الحدي

$$u_2(d,t)=\psi_2(x),\quad 0<t\le T. \tag{٨٢}$$

يتم اسـتبدال الشـروط الحدية المفقودة بشروط المطابقة عنـد نقطـة عـدم الاتصال d_1 لمعامل الانتشار

$$u_1(d_1,t)=u_2(d_1,t),\quad 0<t\le T. \tag{٨٣}$$

$$D_1\frac{\partial u_1(d_1,t)}{\partial x}=D_2\frac{\partial u_2(d_1,t)}{\partial x},\quad 0<t\le T. \tag{٨٤}$$

١٢ – مخطط الفرق الصريح **The Explicit Difference Scheme**

نحن الآن سوف نستبدل مسائل القيمة الحدية لمعادلة الانتشـار مـع معامـل انتشار متصل (٧٧)– (٨٤) بمخططات فـرق صريحـة (مـن نفـس النـوع (١٠)–(١٢)). لتكن الشبكات

$$\overline{Q}_{1,h_1,\tau}=\{(x_i,t_j)\in\overline{Q}_1\},\qquad \overline{Q}_{2,h_2,\tau}=\{(x_i,t_j)\in\overline{Q}_2\}$$

مـع الخطـوات $h_1(h_1n_1=d_1)$ ، و $h_2(h_2n_3=d-d_1)$ و $n_2=n_1+n_3$ و τ عـلى طـول الاتجاهين Ox و Ot على التوالي، في المستطيلين $\overline{Q}_1$ و $\overline{Q}_2$.

لتكن $(x_i, \ t_j)$ نقطة ثابتة للشبكة داخـل المسـتطيلات Q_1 أو Q_2 ونسـتبدل معـادلات الانتشار (٧٧)، (٨٠) بمعادلات الفرق الصريحة

$$\frac{v_{1,i}^{j+1}-v_{1,i}^{j}}{\tau}=D_1\frac{v_{1,i+1}^{j}-2v_{1,i}^{j}+v_{1,i-1}^{j}}{h_1^2}, \quad (٨٥)$$

$$i=1,2,\ldots,n_1-1, \qquad j=1,2,\ldots,m-1,$$

$$\frac{v_{2,i}^{j+1}-v_{2,i}^{j}}{\tau}=D_2\frac{v_{2,i+1}^{j}-2v_{2,i}^{j}+v_{2,i-1}^{j}}{h_2^2}, \quad (٨٦)$$

$$i=n_1+1,n_1+2,\ldots,n_2-1, \qquad j=1,2,\ldots,m-1,$$

والشـروط الابتدائية هي:

$$v_{1,i}^{0}=\varphi(x_i), \quad i=0,1,..,n_1, \ v_{2,i}^{0}=\varphi(x_i), \quad i=n_1,n_1-2,\ldots,n_2. \quad (٨٧)$$

والحدية هي:

$$v_{1,0}^{j}=\psi_1(t_j), \quad j=1,2,..,m, \quad v_{1,n_2}^{j}=\psi_2(t_j), \quad j=1,2,\ldots,m, \quad (٨٨)$$

يتم استبدال شروط المطابقة:

$$v_{1,n_1}^{j}=v_{2,n_1}^{j}, \ D_1\frac{v_{1,n_1}^{j}-v_{1,n_1-1}^{j}}{h_1}=D_2\frac{v_{2,n_1+1}^{j}-v_{2,n_1}^{j}}{h_2}, \quad j=1,2,\ldots,m. \quad (٨٩)$$

معادلات الفرق (٨٥)، (٨٦) جنباً إلى جنب مع الشـــروط الابتدائية (٨٧) والحدية (٨٨) والمطابقة (٨٩) تُشـــكل مخطط فرق بشـــكل مماثل (٨٥)- (٨٩).

إن خطأ تقريب المعادلات التفاضلية (٧٧)، (٨٠) بمعادلات الفرق (٨٥)-(٨٦) هو من الرتبة $O(\tau+h_1^2)$ و $O(\tau+h_2^2)$، ويتم استبدال الشـــروط الابتدائية والحدية تماماً. لشــرط المطابقة الثاني خطأ التقريب $O(h_1+h_1)$، يتم استبدال الأول تماماً.

١ , ١٢ الحساب لحل The Calculation of a Solution

يتم تنفيذ حساب حل مخطط الفرق (٨٥)- (٨٩) في طبقة الشبكة المتسلسلة واحدة تلو الأخرى (على غرار الحالة في مخطط الفرق الصريح). يمكـــن التمييـــز في الحســـاب عند نقطة عدم الاتصال لمعامل الانتشـــار D ($x = d_1$ أو $x = x_{n1}$). لتكن القيم $v_{1,i}^j$، $i = 0,1,\ldots,n_1-1$ و $v_{2,i}^j$، $i = n_1 - 1, n_2 - 2,\ldots,n_2$ محسـوبة. مـن ثم، ومن أجل حســـاب القيمتين v_{1,n_1}^j و v_{2,n_2}^j نطبق شـروط المطابقـة (٨٩). هـذا يُنتـــج:

$$v_{1,n_1}^j = v_{2,n_1}^j = \frac{D_1 v_{1,n_1-1}^j h_2 + D_2 v_{2,n_1+1}^j h_1}{D_1 h_2 + D_2 h_1}.$$

لذا، تم حساب حل الفرق على الطبقة $t = t_j + 1$.

علاوة على ذلك، وبشكل مماثل سـوف نجـد الحـل v_i^j عـلى الطبقـة التاليـة وسوف نستمر حتى نصل إلى الطبقة الأخيرة $t = t_m$. بـذلك ينتهـي حســـاب حـل مخطط الفرق.

١٣ – مخطط فرق كرانك–نيكلسون The Crank - Nicolson Difference Scheme

الآن سوف نستمر بتقريب مسألة القيمة الحدية لمعادلة الانتشار بمعامل انتشار غير متصل. يتم تطبيق مخطط فرق كرانك- نيكلسون في حل (٧٧)-(٨٤). لذلك، فإنه يتبع التالي

$$\frac{v_{1,i}^{j+1}-v_{1,i}^{j}}{\tau}=\frac{D_1}{2}\left(\frac{v_{1,i+1}^{j}-2v_{1,i}^{j}+v_{1,i-1}^{j}}{h_1^2}+\frac{v_{1,i+1}^{j+1}-2v_{1,i}^{j+1}+v_{1,i-1}^{j+1}}{h_1^2}\right),\tag{٩٠}$$
$$i=1,2,\ldots,n_1-1,\qquad j=1,2,\ldots,m-1,$$

$$\frac{v_{2,i}^{j+1}-v_{2,i}^{j}}{\tau}=\frac{D_2}{2}\left(\frac{v_{2,i+1}^{j}-2v_{2,i}^{j}+v_{2,i-1}^{j}}{h_2^2}+\frac{v_{2,i+1}^{j+1}-2v_{2,i}^{j+1}+v_{2,i-1}^{j+1}}{h_2^2}\right),\tag{٩١}$$
$$i=n_1+1,n_1+2,\ldots,n_2-1,\qquad j=1,2,\ldots,m-1.$$

الشـــروط الابتدائية هي

$$v_{1,i}^{0}=\varphi(x_i),\ i=1,\ldots.,n_1,\ v_{2,i}^{0}=\varphi(x_j),\ \ i=n_1+1,n_1+2,\ldots,n_2,\tag{٩٢}$$

والحديـة هي

$$v_{1,0}^{j}=\psi_1(t_j),\ \ j=1,2,..,m,\ v_{2,n_2}^{j}=\psi_2(t_j),\ \ j=1,2,\ldots,m.\tag{٩٣}$$

يتم استبدال شـــروط المطابقة

$$v_{1,n_1}^{j}=v_{2,n_1}^{j},\tag{٩٤}$$

$$D_1\left(\frac{v_{1,n_1}^{j}-v_{1,n_1-1}^{j}}{h_1}+\frac{v_{1,n_1}^{j+1}-v_{1,n_1-1}^{j+1}}{h_1}\right)=D_2\left(\frac{v_{2,n_1+1}^{j}-v_{2,n_1}^{j}}{h_2}+\frac{v_{2,n_1+1}^{j+1}-v_{2,n_1}^{j+1}}{h_2}\right),\tag{٩٥}$$
$$j=1,2,\ldots,m,$$

يتم تجميع مخطط فرق كرانك- نيكلسون (٩٠)- (٩٥) مع معادلات الفرق (٩٠)، و (٩١) مع الشروط الابتدائية (٩٢)، والحدية (٩٣) والمطابقة (٩٤)، (٩٥).

خطأ تقريب المعادلات التفاضلية (٧٧)، (٨٠) بمعادلات الفرق (٩٠)، (٩١) هو من الرتبة $O(\tau^2+h_1^2)$ و $O(\tau^2+h_2^2)$ على التوالي، ويتم استبدال الشروط الابتدائية والحدية تماماً. لشرط المطابقة الثاني خطأ التقريب هو $O(h_1+h_2)$، ويتم استبدال الأول تماماً.

١٣,١ الحساب لحل The Calculation of a Solution

إجراء العملية الحسابية مشابه جداً لمخطط فرق كرانك- نيكلسون (٤٢)- (٤٤). التمييز الرئيس هو نقطة عدم الاتصال. يتم حساب مخطط فرق كرانك- نيكلسون (٩٠)- (٩٥) في طبقة الشبكة المتسلسلة واحدة تلو الأخرى. في البداية يتم حساب الحل على الطبقة صفر عند $t = 0$ باستخدام الشرط الابتدائي (٩٢)

$$v_{1,i}^0=\varphi(x_i),\ \ i=0,1,\ldots,n_1,\ \ v_{2,i}^0=\varphi(x_j),\ \ \ i=n_1+1,n_1+2,\ldots,n_2$$

والآن، ليكن الحل $v_{1,i}^j$ و $v_{2,i}^j$ محسوباً على الطبقة $j\text{–}th$. لذا، فإن القيم $v_{1,i}^j$، $i = 0,1,\ldots,n_1$ و $v_{2,i}^j$، $i=n_1,n_1-1,\ldots,n_2$ تكون معروفة. نمضي في حل معادلات الفرق (٩٠)، (٩١) الخاضعة للقيمة $v_{1,i}^{j+1}$، $v_{2,i}^{j+1}$ على الطبقة $j+1\text{–}th$. بضرب المعادلتين (٩٠)، (٩١) بـ τ يكون لدينا

$$v_{1,i}^{j+1} = v_{1,i}^{j} + \frac{\tau D_1}{2}\left(\frac{v_{1,i+1}^{j} - 2v_{1,i}^{j} + v_{1,i-1}^{j}}{h_1^2} + \frac{v_{1,i+1}^{j+1} - 2v_{1,i}^{j+1} + v_{1,i-1}^{j+1}}{h_1^2}\right), \tag{٩٦}$$

$$i = 1,2,\ldots,n_1 - 1,$$

$$v_{2,i}^{j+1} = v_{2,i}^{j} + \frac{\tau D_2}{2}\left(\frac{v_{2,i+1}^{j} - 2v_{2,i}^{j} + v_{2,i-1}^{j}}{h_2^2} + \frac{v_{2,i+1}^{j+1} - 2v_{2,i}^{j+1} + v_{2,i-1}^{j+1}}{h_2^2}\right), \tag{٩٧}$$

$$i = n_1 + 1, n_1 + 2, \ldots, n_2 - 1.$$

الشـــروط الحدية (٩٣) للطبقــة $j+1-th$ هي

$$v_{1,0}^{j+1} = \psi_1(t_{j+1}), \quad v_{2,n_2}^{j+1} = \psi_2(t_{j+1}). \tag{٩٨}$$

يتم كتابة شـروط المطابقة (٩٤)، و(٩٥) في الصورة:

$$v_{1,n_1}^{j+1} = v_{2,n_1}^{j+1}, \tag{٩٩}$$

$$\begin{aligned} & D_1(v_{1,n_1}^{j} - v_{1,n_1-1}^{j} + v_{1,n_1}^{j+1} - v_{1,n_1-1}^{j+1}), \\ & = \frac{D_2 h_1}{h_2}(v_{2,n_1+1}^{j} - v_{2,n_1}^{j} + v_{2,n_1+1}^{j+1} - v_{2,n_1}^{j+1}). \end{aligned} \tag{١٠٠}$$

تتضمن المعادلتـان الفرقيتـان (٩٦)، (٩٧) مـع الشـــرطين الحـديين (٩٨) وشـــرطي المطابقة (٩٩)، (١٠٠) مجموعة المعادلات الخطية n_2 بالقيم المجهولة n_2 .

$$v_{1,i}^{j}, \quad i = 1,2,\ldots,n_1,$$

$$v_{2,i}^{j}, \quad i = n_1, n_1 + 1, \ldots, n_2 - 1.$$

المعادلتان الفرقيتان (٩٦)، (٩٧) وشـرطي المطابقة (٩٩)، (١٠٠) يتكونان من عدد لا يتجاوز ثلاث قيم مجهولة.

في هذه الحالة تكون مجموعة المعادلات الخطية ثلاثية قطرية.

الخطوة التالية هي إحصاء القيم $v_{1,i}^{j+1}$ و $v_{2,i}^{j+1}$. لهذا الغرض نُعيد كتابة مجموعة المعادلات الخطية (٩٦)– (١٠٠) في شــكل جديــد ونقدم الترميزات

$$a_i = b_i = \frac{\tau D_1}{h_1^2}, \quad c_i = 1 + \frac{\tau D_1}{h_1^2}, \quad i = 1,2,\dots,n_1 - 1,$$

$$a_i = b_i = \frac{\tau D_2}{h_2^2}, \quad c_i = 1 + \frac{\tau D_2}{h_2^2}, \quad i = n_1 + 1, n_1 + 2,\dots,n_2 - 2,$$

$$a_{n_1} = D_1,\ c_{n_1} = D_1 + \frac{D_2 h_1}{h_2}, \quad b_{n_1} = \frac{D_2 h_1}{h_2},$$

$$\beta_1 = \frac{\tau D_1}{2(h_1^2 + \tau D_1)}, \quad \mu_1 = \frac{v_{1,1}^j (h_1^2 + \tau D_1) + (v_{1,2}^j + v_{1,0}^j + \psi_1(t_j))/2}{h_1^2 + \tau D_1},$$

$$\beta_2 = \frac{\tau D_2}{2(h_2^2 + \tau D_2)},$$

$$\mu_2 = \left(v_{2,n_2-1}^j + \frac{\tau D_2}{2h_2^2}\left(v_{2,n_2}^j - 2v_{2,n_2-1}^j + v_{2,n_2-2}^j + \psi_2(t_j) \right) \right) \frac{h_2^2 + \tau D_2}{h_2^2},$$

$$f_i = v_{1,i}^j + \tau \frac{D_1}{2} \left(\frac{v_{1,i+1}^j - 2v_{1,i}^j + v_{1,i-1}^j}{h_1^2} \right),$$

$$i = 2,3,\dots,n_1 - 1,$$

$$f_i = v_{2,i}^j + \tau \frac{D_2}{2} \left(\frac{v_{2,i+1}^j - 2v_{2,i}^j + v_{2,i-1}^j}{h_2^2} \right),$$

$$i = n_1 + 1, n_1 + 2,\dots,n_2 - 2,$$

$$f_{n_1} = \frac{D_2 h_1}{h_2}(v_{2,n_1+1}^j - v_{2,n_1}^j) - D_1(v_{1,n_1}^j - v_{1,n_1-1}^j),$$

$$s_i = v_{1,i}^j,\ i = 1,2,\dots,n_1 - 1, \quad s_i = v_{2,i}^j, \quad i = n_1, n_1 + 1,\dots,n_2 - 1.$$

أخيراً، تأخذ المجموعة الصورة التالية

$$s_1 = \beta_1 s_2 + \mu_1, \quad (١٠١)$$

$$a_i s_{i-1} - c_i s_i + b_i s_{i+1} = f_i, \quad i = 1,2,\ldots,n-1, \quad (١٠٢)$$

$$s_{n_2-1} = \beta_2 s_{n_2-2} + \mu_2. \quad (١٠٣)$$

الآن يمكن تطبيق طريقة التدفق المتغير في حل المجموعة (١٠١)– (١٠٣). في هذه الحالة سوف نجد حل مخطط فرق كرانك- نيكلسون (٩٠)– (٩٥) على الطبقة $t = t_{j+1}$. علاوة على ذلك، وبشكل مماثل سوف نجد الحل على الطبقة التالية، وسوف نستمر حتى نصل إلى الطبقة الأخيرة $t = t_m$.

لذلك تم تحويل حل المخطط إلى مجموعة معادلات خطية على كل طبقة بمصفوفات ثلاثية قطرية. لقد تم حل المجموعة التي تم الحصول عليها من المعادلات الخطية بطريقة التدفق المتغير. يظهر التمييز في الحساب عند نقطة عدم الاتصال لمعامل الانتشار D ($x = d_1$، $x = x_{n1}$). بهذا تنتهي طريقة حل مخطط فرق كرانك- نيكلسون.

مخططات الفرق لمعادلات تفاعل الانتشار

The Difference Schemes for the Reaction-Diffusion Equations

هذا الفصل مخصص لتقريبات الفرق المختلفة لمعادلات الانتشار. تستخدم تقنية الفرق، الذي تم تطويره في الفصل السابق، لبناء مخطط الفرق لمجموعة معادلات تفاعل الانتشار.

١ -مسألة القيمة الحدية لمجموعة معادلات تفاعل الانتشار

The Boundary–Value Problem for the System of Reaction-Diffusion Equations

الموضوع الرئيس للدراسة هو مجموعة غير خطية لمعادلتين تفاضليتين جزئيتين:

$$\frac{\partial S}{\partial t} = D_S \Delta S - \frac{V_{\max} S}{K_M + S}, \qquad (١)$$

$$\frac{\partial P}{\partial t} = D_P \Delta P - \frac{V_{\max} S}{K_M + S}, \qquad (٢)$$

حيث إن Δ هو مؤثر لابلاس

$$\Delta S = \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 S}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 S}{\partial z^2},$$

$$\Delta P = \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 P}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 P}{\partial z^2},$$

حيث إن D_S و D_P هما معاملا انتشار، و $V_{\max}$ المعـدل الإنزيمـي الأعظمـي، وK_M ثابـت ميكـايليس. الـدالتان $S = S(x, y, z)$، $P = P(x, y, z)$ همـا عـادةً تركيـزات الركيزة والناتج على التوالي، وx، y، z الإحداثيات المكانية و t الزمن. تم دراسـة مجموعة المعادلتين (١) و(٢) في بعض المنطقـة $Q = \Omega \times [0, T]$. المنطقـة المفتوحـة ثلاثية الأبعاد Ω تكون عادة مسـاحة التفاعـل والانتشـار للحسـاس الحيـوي. القيمة T هي مدة عمل الحساس الحيوي. تمتلـك مجموعـة المعـادلتين (١) و(٢) عدداً لا نهائي من الحلول. من أجل فصل حل وحيد فمـن الضــروري إضـافة الشـروط الابتدائية والحدية. تصف الشروط الابتدائية حالـة البـدء للحسـاس الحيوي (عند زمن $t = 0$) ويتم صياغتها في المنطقة Ω. يصف الشــرط الحـدي حالة الحل على المنطقة الحدودية Ω. في بادئ الأمر سوف ندرس مثالاً بسيطاً من المنطقة (موازي السطوح) $\Omega = \{(x, y, z): 0 < x < d_x , 0 < y < d_y , 0 < z < d_z\}$، حيث إن d_x، d_y، و d_z هي حجم مساحة العمل.

الشـروط الابتدائية لـ $t = 0$ هي

$$(٣)\quad S(x,y,z,0) = \varphi_S(x,y,z),\quad P(x,y,z,0) = \varphi_P(x,y,z),\quad (x,y,z) \in \overline{\Omega},$$

والشـروط الحدية هي

$$(٤)\quad S(x,y,z,t) = \psi_S(x,y,z), P(x,y,z,t) = \psi_P(x,y,z), (x,y,z) \in \partial\Omega, t \in [0,T],$$

حيث إن $\varphi_S(x, y, z)$ ، $\varphi_P(x, y, z)$ ، $\psi_S(x, y, z)$ و $\psi_P(x, y, z)$ هي دوال معطاة.

$$\overline{\Omega} = \{(x, y, z,) : 0 \le x \le d_x, 0 \le y \le d_y, 0 \le z \le d_z\}$$

منطقة مغلقة و $\partial\Omega$ هي حد المنطقة Ω (سطح موازي السطوح).

مجموعة المعادلات التفاضلية (١)، (٢) مع الشروط الابتدائية (٣) والحدية (٤) تسمى مسألة القيمة الحدية. من الجدير بالذكر، أن الشرط الحدي (٤) ينتمي إلى مثال معين، وفي الفقرات التالية سوف نفحص الأنواع الأخرى. علاوة على ذلك، فسوف نفترض أن حل مسألة القيمة الحدية (١)-(٤) موجود، وهو حل وحيد أملس بما فيه الكفاية (للدوال S، P مشتقات جزئية ملساء فيما يتعلق بـ x، y، z و t من الرتبة الضرورية).

٢ - مخطط الفرق الصريح The Explicit Difference Scheme

علينا أن نبدأ ببناء مخطط الفرق لعمليات تفاعل الانتشار في حساس حيوي في حالة أحادية البعد (الزمن t وفضاء أحادي البعد x). يحظى مخطط الفرق الصريح بشعبية بسبب بساطة برمجته. سوف ندرس مسألة القيمة الحدية لمجموعة من معادلتي تفاعل انتشار غير خطية

$$\frac{\partial S}{\partial t} = D_p \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} - \frac{V_{\max} S}{K_M + S}, \quad (٥)$$

$$\frac{\partial P}{\partial t} = D_p \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} + \frac{V_{\max} S}{K_M + S}, \quad (٦)$$

في مستطيل $Q = \{0 < x < d, 0 < t \le T\}$ **مع الشروط الابتدائية لـ** $t = 0$

$$S(x,0) = \varphi_S(x), \quad P(x,0) = \varphi_P(x,), \quad x \in [0,d] \quad (٧)$$

والشروط الحدية:

$$\frac{\partial S(0,t)}{\partial x} = 0,\ S(d,t) = \psi_S(t),\ P(0,t) = 0,\ \frac{\partial P(d,t)}{\partial x} = 0,\ t \in [0,T], \quad (٨)$$

حيث إن $\varphi_S(x)$، $\varphi_P(x)$، و $\psi_S(t)$ هي الدوال المعطاة ومعاملات الانتشار $D_S>0$، $D_P>0$.

يتم تطبيق هذه الشروط الحدية عندما يكون هناك تدفق للركيزة S على الجانب الأيمن من الشرط الحدي (النقطة $x = d$) والناتج على الجانب الأيسر من الشرط الحدي (النقطة $x = 0$). بالاشتراك سوياً لا يوجد تدفق من الركيزة على الجانب الأيسر من الشرط الحدي والناتج على الجانب الأيمن من الشرط الحدي.

الآن يتم استخدام تقنية الفرق- التي تم تطويرها في الفصل السابق- لبناء مخططات الفرق لمجموعة معادلات تفاعل الانتشار. لذا يكون لدينا

$$\frac{S_i^{j+1}-S_i^j}{\tau}=D_S\frac{S_{i+1}^j-2S_i^j+S_{i-1}^j}{h^2}-\frac{V_{\max}S_i^j}{K_M+S_i^j}, \tag{٩}$$

$$\frac{P_i^{j+1}-P_i^j}{\tau}=D_P\frac{P_{i+1}^j-2P_i^j+P_{i-1}^j}{h^2}+\frac{V_{\max}S_i^j}{K_M+S_i^j}, \tag{١٠}$$

$$i=1,2,....,n-1,\quad j=0,1,.....,m-1,$$

بالشروط الابتدائية.

$$S_i^0=\varphi_S(x_i),\quad P_i^0=\varphi_P(x_i),\ \ i=0,1,....,n, \tag{١١}$$

والشروط الحدية

$$\frac{S_1^j-S_0^j}{h}=0,\quad S_n^j=\psi_S(t_j),\ P_0^j=0,\quad \frac{P_n^j-P_{n-1}^j}{h}=0,\quad j=1,2,....,m. \tag{١٢}$$

يمكن حساب خطأ التقريب بطريقة مشابهة ، وبمعنى آخر: كما في حالة مسألة القيمة الحدية لمعادلة الانتشار. إذا كانت المشتقات الجزئية $S(x,t)$ و $P(x,t)$ تحقق التقديرات.

$$\max\left|\frac{\partial^2 S(x,t)}{\partial t^2}\right|,\ \max\left|\frac{\partial^2 P(x,t)}{\partial t^2}\right| = c < \infty,$$

و

$$\max\left|\frac{\partial^4 S(x,t)}{\partial x^4}\right|,\ \max\left|\frac{\partial^4 P(x,t)}{\partial x^4}\right| = c < \infty,$$

في منطقة الفحص $\overline{Q}$، ومن ثم رتبة التقريب لمجموعة المعادلات التفاضلية (٥)، (٦) بمجموعة معادلات الفرق (٩)، (١٠) تساوي $O(\tau + h^2)$ كلما $\tau, h \to 0$. ورتبة التقريب للشروط الحدية (٨) بالشروط الحدية للفرق (١٢) هي $O(h)$ (حيث لا يوجد تدفق). يتم استبدال الشروط الحدية المتبقية والشروط الابتدائية (٧) تماماً.

مجموعة الفرق (٩)- (١٢) صريحة وثنائية الطبقة.

١ , ٢ الحساب لحل The Calculation of a Solution

حساب حل مخطط الفرق (٩)- (١٢) مشابه لحساب حل المخطط الصريح لمسألة القيمة الحدية (١٠)- (١٢) في الفصل السابق. يجدر التأكيد على أن معادلة الفرق (٩) مستقلة عن معادلة الفرق (١٠)، ويمكن حسابها على حده. يبدو واضحاً أنه يمكن حساب القيم S_i^j أولاً وكل القيم P_i^j لاحقاً

$$i = 1,2,\dots\dots, n-1, \quad j = 0,1,\dots\dots, m-1.$$

لكن هذه الطريقة ليست مثالية من وجهة نظر ذاكرة الكمبيوتر. حيث تتطلب هذه الحالة ذاكرة كمبيوتر لحفظ على الأقل $(n+1)(m+1)$ قيم S_i^j. إذا حسبنا القيم S_i^j و P_i^j بشكل متزامن، ومن ثم فأنها تكون كافية لحفظ

$$2(n+1)$$

قيم S_i^j و P_i^j على الطبقتين $t = t_j$ و $t = t_{j+1}$. قد تبين أن حساب القيم النهائية S_i^m و S_i^m هو الأكثر ملاءمة لحل المعادلات (٩)، (١٠) بشكل متزامن.

يتم تنفيذ العملية الحسابية في طبقة الشبكة المتسلسلة الواحدة تلو الأخرى. في بادئ الأمر يتم حساب الحل على الطبقة صفر عند $t = 0$ باستخدام الشروط الابتدائية.

$$S_i^0 = \varphi_S(x_i),\ \ P_i^0 = \varphi_P(x_i),\ \ i = 0,1,\ldots,n. \tag{11}$$

الآن، لتكن الحلول S_i^j و P_i^j محسوبة في الطبقة j-th. لذا، فإن القيم S_i^j و P_i^j لـ $i = 0, 1, \ldots, n$ تكون معروفة. نمضي في حل معادلات الفرق (٩)، (١٠) الخاضعة لقيم S_i^{j+1} و P_i^{j+1} في الطبقة $j + th$. يكون لدينا

$$S_i^{j+1} = S_i^j + \tau\left(D_S \frac{S_{i+1}^j - 2S_i^j + S_{i-1}^j}{h^2} - \frac{V_{\max} S_i^j}{K_M + S_i^j} \right),$$

$$P_i^{j+1} = P_i^j + \tau\left(D_P \frac{P_{i+1}^j - 2P_i^j + P_{i-1}^j}{h^2} + \frac{V_{\max} S_i^j}{K_M + S_i^j} \right),$$

$$i = 1,2,\ldots,n-1, \quad j = 0,1,\ldots,m-1.$$

كل قيم الدوال S_i^j و P_i^j معروفة على الجانب الأيمن من المتساوية. هكذا نستطيع حساب القيم S_i^j من المعادلة الأولى لـ $i = 1, 2, \ldots, n-1$، ومن ثم، وبناءً عليه، حساب S_i^j من المعادلة الثانية $i = 1, 2, \ldots, n-1$. يتم حساب القيم S_0^{j+1}، S_n^{j+1} و P_0^{j+1} و P_n^{j+1} باستخدام الشروط الحدية (١٢) و

$$S_0^{j+1} = S_1^{j+1},\ \ S_n^{j+1} = \psi_S(t_{j+1}),\ \ P_0^{j+1} = 0, P_n^{j+1} = P_{n-1}^{j+1}.$$

علاوة على ذلك، وبشكل مماثل، سوف نجد الحلول S_i^{j+2} و P_i^{j+2} على الطبقة التالية ،وسوف نستمر حتى نصل إلى الطبقة الأخيرة $t = t_m$.

٢ , ٢ التقارب والاستقرار The Convergence and the Stability

الطريقة الصريحة مستقرة بشكل مشروط وتتقارب بالمعدل $O(\tau + h^2)$. المعادلات التفاضلية غير خطية ويمكن صياغة الشروط الكافية للاستقرار

$$\frac{\tau \max\{D_S, D_P\}}{h^2} \le 1/4, \quad \frac{\tau V_{\max}}{K_M} \le 1/2.$$

٣- مخطط فرق كرانك- نيكلسون من النوع غير الخطي

The Non-linear Crank-Nicolson Type Difference Scheme

الآن سنقدم مخطط الفرق الثاني (نوع كرانك- نيكلسون غير الخطي) لحل عمليات تفاعل الانتشار في حساس حيوي في حالة أحادية البعد. سوف نعتبر مسألة القيمة الحدية لمجموعة معادلات تفاعل الانتشار

$$\frac{\partial S}{\partial t} = D_S \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} - \frac{V_{\max} S}{K_M + S}, \qquad (١٣)$$

$$\frac{\partial P}{\partial t} = D_P \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} + \frac{V_{\max} S}{K_M + S}, \qquad (١٤)$$

في مستطيل $Q = \{0 < x < d,\ 0 < t \le T\}$ بالشروط الابتدائية لـ $t = 0$

$$S(x,0) = \varphi_S(x), \quad P(x,0) = \varphi_P(x,), \quad x \in [0,d], \qquad (١٥)$$

والشروط الحدية (مختلفة عن (٨))

$$S(0,t) = 0,\ S(d,t) = \psi_S(t),\ P(0,t) = 0,\ P(d,t) = 0,\ t \in [0,T], \qquad (١٦)$$

حيث إن $\varphi_S(x)$، $\varphi_P(x)$، و $\psi_S(t)$ هي الدوال المعطاة ومعاملات الانتشار $D_S>0$، $D_P>0$.

يتم تطبيق الشروط الحدية (١٦) عندما يكون هناك تدفق للركيزة والناتج على كلا جانبي الحد (النقاط $x=0$، $x=d$).

الآن يتم استخدام طريقة الفرق التي تم تطويرها في الفصل السابق- لمخطط فرق كرانك- نيكلسون (٤٢)- (٤٤)، لبناء مخطط فرق لمسألة القيمة الحدية لمجموعة معادلات تفاعل الانتشار (١٣)- (١٦). يكون لدينا

$$\frac{S_i^{j+1}-S_i^j}{\tau}= \frac{D_S}{2}\left\{\frac{S_{i+1}^{j+1}-2S_i^{j+1}+S_{i-1}^{j+1}}{h^2}+\frac{S_{i+1}^{j}-2S_i^{j}+S_{i-1}^{j}}{h^2}\right\} -\frac{V_{\max}(S_i^j+S_i^{j+1})/2}{K_M+(S_i^j+S_i^{j+1})/2}, \tag{١٧}$$

$$\frac{P_i^{j+1}-P_i^j}{\tau}= \frac{D_P}{2}\left\{\frac{P_{i+1}^{j+1}-2P_i^{j+1}+P_{i-1}^{j+1}}{h^2}+\frac{P_{i+1}^{j}-2P_i^{j}+P_{i-1}^{j}}{h^2}\right\} -\frac{V_{\max}(S_i^j+S_i^{j+1})/2}{K_M+(S_i^j+S_i^{j+1})/2}, \tag{١٨}$$

$$i=1,2,....,n-1,\quad j=0,1,.....,m-1.$$

يتم استبدال الشـروط الابتدائية والحدية كالتالي بـ

$$S_i^0=\varphi_S(x_i),\quad P_i^0=\varphi_P(x_i),\ \ i=0,1,....,n, \tag{١٩}$$

$$S_0^j=0,\ S_n^j=\psi_S(t_j),\ \ P_0^j=0,\ P_n^j=0,\quad j=1,2,....,m. \tag{٢٠}$$

يمكن حساب خطأ التقريب بطريقة مشابهة، وبمعنى آخر: كما في حالة مسألة القيمة الحدية لمعادلة الانتشار. إذا كانت المشتقات الجزئية $S(x, t)$ و $P(x, t)$ تحقق التقديرات

$$max\left|\frac{\partial^3 S(x,t)}{\partial t^3}\right|,\ max\left|\frac{\partial^3 P(x,t)}{\partial t^3}\right| = c < \infty,$$

و

$$max\left|\frac{\partial^4 S(x,t)}{\partial x^4}\right|,\ max\left|\frac{\partial^4 P(x,t)}{\partial x^4}\right| = c < \infty,$$

في منطقة الدراسه $\overline{Q}$، ومن ثم فإن رتبة التقريب لمجموعة المعادلات التفاضلية (١٣)، (١٤) بمجموعة معادلات الفرق (١٧)، (١٨) تساوي $O(\tau^2 + h^2)$ عندما $\tau, h \to 0$، ويتم استبدال الشروط الابتدائية (١٩) والحدية (٢٠) تماماً؛ يكون مخطط الفرق ضمني وفي طبقتين.

١, ٣ الحساب لحل The Calculation of a Solution

حساب حل مخطط الفرق (١٧)- (٢٠) مشابه لحساب حل المخطط الضمني لمسألة القيمة الحدية (٤٢)- (٤٤) في الفصل السابق. لكن هناك فرقاً جوهريًا هو حد غير خطي، ويظهر الجزء غير الخطي في الكسر

$$\frac{V_{\max}\left(S_i^j + S_i^{j+1}\right)/2}{K_M + \left(S_i^j + S_i^{j+1}\right)\ /2},$$

باحتواء قيمة مجهولة على الطبقة العليا S_i^{j+2} في مقام الكسر. لتحقيق هذه المعادلة العددية لا بد من استخدام طريقة التكرار للحل.

يتم تنفيذ العملية الحسابية في طبقة الشبكة المتسلسلة الواحدة تلو الأخرى.
في البداية يتم حساب الحل على الطبقة صفر عندما $t = 0$ باستخدام الشروط الابتدائية (١٩)

$$S_i^0 = \varphi_S(x_i), \quad P_i^0 = \varphi_P(x_i), \quad i = 0,1,\ldots,n.$$

بافتراض أن الحلول S_i^j و P_i^j محسوبة في الطبقة $j-th$. هكذا، فإن القيم S_i^j و P_i^j لـ $i = 0, 1, \ldots, n$ تكون معروفة. نمضي في حل معادلات الفرق (١٧)، (١٨) الخاضعة لقيم S_i^{j+1} و P_i^{j+1} في الطبقة $j+1-th$. نضرب هذه المعادلات بـ τ ولدينا

$$\begin{aligned} S_i^{j+1} &= S_i^j \\ &+ \tau\left(\frac{D_S}{2}\left\{\frac{S_{i+1}^{j+1} - 2S_i^{j+1} + S_{i-1}^{j+1}}{h^2} + \frac{S_{i+1}^j - 2S_i^j + S_{i-1}^j}{h^2}\right\}\right. \\ &\left. - \frac{V_{\max}(S_i^j + S_i^{j+1})/2}{K_M + (S_i^j + S_i^{j+1})/2}\right), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} P_i^{j+1} &= P_i^j \\ &+ \tau\left(\frac{D_S}{2}\left\{\frac{P_{i+1}^{j+1} - 2P_i^{j+1} + P_{i-1}^{j+1}}{h^2} + \frac{P_{i+1}^j - 2P_i^j + P_{i-1}^j}{h^2}\right\}\right. \\ &\left. - \frac{V_{\max}(S_i^j + S_i^{j+1})/2}{K_M + (S_i^j + S_i^{j+1})/2}\right), \end{aligned}$$

$$i = 1,2,\ldots,n-1.$$

الشروط الحدية في الطبقة $j+1-th$ هي

$$S_0^{j+1} = 0, \quad S_n^{j+1} = \psi_S(t_{j+1}), \quad P_0^{j+1} = 0, \; P_n^{j+1} = 0.$$

وبناءً عليه، فإن القيم الحديثة S_0^{j+1}، S_i^{j+1}، P_0^{j+1} و P_i^{j+1} تكون معروفة. يُنتج هذا مجموعة غير خطية من الرتبة $2n-2$ فيما يتعلق بالقيم المجهولة S_i^{j+1} و P_i^{j+1} لـ $i=1, 2, \ldots, n-1$. نتيجة لأن حل هذه المعادلات غير خطي فسوف نطرح الطريقة التكرارية

$$\begin{aligned}
S_i^{(l+1)} &= S_i^j \\
&+\tau\left(\frac{D_S}{2}\left(\frac{S_{i+1}^{(l+1)}-2S_i^{(l+1)}+S_{i-1}^{(l+1)}}{h^2}+\frac{S_{i+1}^j-2S_i^j+S_{i-1}^j}{h^2}\right)\right. \\
&\left.-\frac{V_{\max}(S_i^j+S_i^{(l+1)})/2}{K_M+(S_i^j+S_i^{(l)})/2}\right),
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
P_i^{(l+1)} &= P_i^j \\
&\tau\left(\frac{D_P}{2}\left\{\frac{P_{i+1}^{(l+1)}-2P_i^{(l+1)}+P_{i-1}^{(l+1)}}{h^2}+\frac{P_{i+1}^j-2P_i^j+P_{i-1}^j}{h^2}\right\}\right. \\
&\left.-\frac{V_{\max}(S_i^j+S_i^{(l+1)})/2}{K_M+(S_i^j+S_i^{(l)})/2}\right),
\end{aligned}$$

$$i=1,2,\ldots.,n-1.$$

حيث إن $S_i^{(l)}$، $P_i^{(l)}$، و $S_i^{(l+1)}$، $P_i^{(l+1)}$ القيم التكرارية لـ S_i^{j+1} و P_i^{j+1}. هنا $l-th$ و $l+1-th$ أعداد التكرار. لـ $l=0$ نأخذ القيم الابتدائية لتكرار الطبقة $j-th$.

$$S_i^{(0)}=S_i^j,\quad P_i^{(0)}=P_i^j,\quad i=1,2,\ldots.,n-1.$$

الآن سوف نستمر بحساب قيم التكرار $S_i^{(l+1)}$ و $P_i^{(l+1)}$. غني عن القول أن اختيار الرمز المناسب يمكن أن يبسط التطوير. دعنا نقدم $s_i=S_i^{j+1}$ و $p_i=P_i^{j+1}$، ومن ثم يمكن كتابة طريقة التكرار كالتالي:

$$a_i s_{i-1} - c_i s_i + b_i s_{i+1} = f_i, \tag{٢١}$$

$$\bar{a}_i p_{i-1} - \bar{c}_i p_i + \bar{b}_i p_{i+1} = \bar{f}_i, \tag{٢٢}$$

$$i = 1,2,....,n-1,$$

حيث إن :

$$a_i = b_i = \frac{\tau D_S}{2h^2},\ c_i = 1 + \frac{\tau D_S}{h^2},$$
$$\bar{a}_i = \bar{b}_i = \frac{\tau D_P}{2h^2},\ \bar{c}_i = 1 + \frac{\tau D_P}{h^2},$$
$$f_i = -S_i^j - \tau\left(D_S \frac{S_{i+1}^j - 2S_i^j + S_{i-1}^j}{2h^2} - \frac{V_{\max} S_i^j}{K_M + S_i^j}\right),$$
$$\bar{f}_i = -P_i^j - \tau\left(D_P \frac{P_{i+1}^j - 2P_i^j + P_{i-1}^j}{2h^2} + \frac{V_{\max} S_i^j}{K_M + S_i^j}\right),$$

لـ $i = 1,2,....,n-2$.

القيم

$$a_1 = 0,\ b_1 = \frac{\tau D_S}{2h^2},\ c_1 = 1 + \tau\left(\frac{D_S}{h^2} + \frac{V_{\max}}{2K_M + S_1^j + S_1^{(l)}}\right),$$
$$\mathrm{a}_{n-1} = \frac{\tau \mathrm{D_S}}{2\mathrm{h}^2},\ \mathrm{b}_{n-1} = 0,\quad \mathrm{c}_{n-1} = 1 + \tau\left(\frac{\mathrm{D_S}}{\mathrm{h}^2} + \frac{\mathrm{V_{max}}}{2\mathrm{K_M} + \mathrm{S}_{n-1}^j + \mathrm{S}_{n-1}^{(l)}}\right)\mathrm{m},$$
$$\bar{a}_1 = 0,\ \bar{b}_1 = \frac{\tau D_P}{2h^2},\ \bar{c}_1 = 1 + \tau\left(\frac{D_P}{h^2} - \frac{V_{\max}}{2K_M + S_1^j + S_1^{(l)}}\right),$$
$$\bar{a}_{n-1} = \frac{\tau D_P}{2h^2},\ \bar{b}_{n-1} = 0,\ \bar{c}_{n-1} = 1 + \tau\left(\frac{D_P}{h^2} - \frac{V_{\max}}{2K_M + S_{n-1}^j + S_{n-1}^{(l)}}\right),$$
$$f_1 = -S_1^j - \tau\left(D_S \frac{S_2^j - 2S_1^j + S_0^j}{2h^2} - \frac{V_{\max} S_1^j}{2K_M + S_1^j + S_1^{(l)}}\right),$$

$$f_{n-1} = -S_{n-1}^j - \tau\left(D_S \frac{S_n^j - 2S_{n-1}^j + S_{n-2}^j}{2h^2} \right.$$

$$\left. - \frac{V_{\max} S_{n-1}^j}{2K_M + S_{n-1}^j + S_{n-1}^{(l)}} + \frac{D_S \psi_S(t_{j+1})}{2h^2} \right),$$

$$\bar{f}_1 = -P_1^j - \tau\left(D_P \frac{P_2^j - 2P_1^j + P_0^j}{2h^2} - \frac{V_{\max} S_1^j}{2K_M + S_1^j + S_1^{(l)}} \right),$$

$$\bar{f}_{n-1} = -P_{n-1}^j - \tau D_P \frac{P_n^j - 2P_{n-1}^j + P_{n-2}^j}{2h^2}$$

$$+ \frac{\tau V_{\max} S_{n-1}^j}{2K_M + S_{n-1}^j + S_{n-1}^{(l)}}.$$

كل القيم S_i^j، P_i^j، و $S_i^{(l)}$، $P_i^{(l)}$ معروفة. لذلك، يمكن حساب معاملات الأنظمة (٢١)، (٢٢).

$$a_i, b_i, c_i, f_i, \bar{a}_i, \bar{b}_i, \bar{c}_i, \bar{f}_i.$$

الخطوة التالية هي حل هذا المجموعة (حساب القيم s_i و p_i، $i = 1,2,....,n-1$). كما حدث في الحالات السابقة (مخططات فرق كرانك-نيكلسون) سوف نطبق طريقة الحذف لحل مجموعة المعادلات الخطية بمصفوفات ثلاثية قطرية (متغير التدفق لطريقة الحذف). استعداداً لهذا، يمكننا إنشاء المجموعة (٢١)، (٢٢) بـ

$$s_1 = \beta_1 s_2 + \mu_1,$$
$$a_i s_{i-1} - c_i s_i + b_i s_{i+1} = f_i, \quad i = 2,3,...,n-2,$$
$$s_{m-1} = \beta_2 s_{m-2} + \mu_2,$$
$$p_1 = \bar{\beta}_1 p_2 + \bar{\mu}_1,$$
$$\bar{a}_i p_{i-1} - \bar{c}_i p_i + \bar{b}_i p_{i+1} = \bar{f}_i, \quad i = 2,3,....,n-2,$$

$$p_{m-1} = \overline{\beta}_2 p_{m-2} + \overline{\mu}_2,$$

حيث إن

$$\begin{aligned}
&\beta_1 = b_1 / c_1 \quad \mu_1 = -f_1 / c_1,\\
&\beta_2 = a_{n-1} / c_{n-1}, \;\; \mu_2 = (f_{n-1} - b_{n-1})\psi(t_{j+1}) / c_{n-1},\\
&\overline{\beta}_1 = \overline{b}_1 / \overline{c}_1, \quad \overline{\mu}_1 = -\overline{f}_1 / \overline{c}_1,\\
&\overline{\beta}_2 = \overline{a}_{n-1} / \overline{c}_{n-1}, \quad \overline{\mu}_2 = \overline{f}_{n-1} / \overline{c}_{n-1}.
\end{aligned}$$

يمكننا تطبيق طريقة الحذف من أجل حل هذه المجموعات. أولاً: يتم حساب القيم s_i، ثانياً: يتم حساب القيم p_i. لذلك، التكرار التالي من $S_i^{(l+1)}$ و $P_i^{(l+1)}$ يكون معروفاً. عادةً، يتم إيقاف عملية التكرار، عندما تكون قيم التكرار المجاورة مضبوطة تقريباً أو أكثر ضبطاً

$$\left|S_i^{(l+1)} - S_i^{(l)}\right| \le \varepsilon,$$

$$\left|P_i^{(l+1)} - P_i^{(l)}\right| \le \varepsilon, \quad i = 1,2,\dots,n-1,$$

حيث إن $0 < \varepsilon$ هو عدد صغير، وعندما تحقق الشروط الأخيرة عملية التكرار يتم التوقف ونأخذ

$$P_i^{j+1} = P_i^{(l+1)}, \quad S_i^{j+1} = s_i^{(l+1)}, \quad i = 1,2,\dots,n-1.$$

يتم حساب القيم $S_0^{(l+1)}$، $S_n^{(l+1)}$، و $P_0^{(l+1)}$، $P_n^{(l+1)}$ باستخدام الشروط الحدية وهي تساوي

$$S_0^{(l+1)} = 0, \quad S_n^{(l+1)} = \psi_S(t_{j+1}), \quad P_0^{(l+1)} = 0, \quad P_n^{(l+1)} = 0.$$

علاوة على ذلك، وبشكل مماثل، سوف نجد الحلول S_i^j و P_i^j على الطبقة التالية ونستمر حتى نصل إلى الطبقة الأخيرة $t = t_m$.

٣,٢ التقارب والاستقرار The Convergence and the Stability

تتقارب الطريقة التكرارية إذا تم تحقيق شــرط الكفاية

$$\frac{\tau V_{\max}}{K_M} \leq 1/2.$$

طريقة كرانك– نيكلسون غير الخطية مستقرة دون قيدٍ أو شرطٍ وتتقارب بالمعدل $O(\tau^2 + h^2)$. جدير بالذكر أن استقرار مخطط الفرق وتقارب الطريقة التكرارية لإيجاد حل المجموعة غير الخطية هي مسائل مستقلة.

٤ –مخطط فرق كرانك– نيكلسون من النوع الخطي

The Linear Crank-Nicolson Type Difference Scheme

في هذا المقطع سوف ندرس مخطط فرق كرانك – نيكلسون من النوع الخطي. تم تنفيذ خطية مخطط الفرق بتبسيط تقريب الحد الخطي $V_{max}S/(K_M + S)$. لا يتطلب هذا المخطط عمليات تكرارية للحسابات. لأغراض الحساب، فإنه من السهل في بعض الأحيان تطبيق المخطط الخطي.

سوف ندرس مرة أخرى مسألة القيمة الحدية (٥)– (٨). مشابهة للمقطع السابق، يمكن للمرء أن يحصل على مخطط الفرق

$$\frac{S_i^{j+1} - S_i^j}{\tau} = \frac{D_S}{2}\left\{\frac{S_{i+1}^{j+1} - 2S_i^{j+1} + S_{i-1}^{j+1}}{h^2} + \frac{S_{i+1}^j - 2S_i^j + S_{i-1}^j}{h^2}\right\} - \frac{V_{\max} S_i^{j+1}}{K_M + S_i^{j+1}}, \qquad (٢٣)$$

$$\frac{P_i^{j+1}-P_i^j}{\tau} = \frac{D_S}{2}\left\{\frac{P_{i+1}^{j+1}-2P_i^{j+1}+P_{i-1}^{j+1}}{h^2}+\frac{P_{i+1}^{j}-2P_i^{j}+P_{i-1}^{j}}{h^2}\right\} - \frac{V_{\max}S_i^{j+1}}{K_M+S_i^j}, \qquad (٢٤)$$

$$i=1,2,....,n-1, \quad j=0,1,.....,m-1.$$

يتم استبدال الشـــروط الابتدائية والحدية كالتالي بـ

$$S_i^0=\varphi_S(x_i), \quad P_i^0=\varphi_P(x_i), \quad i=0,1,....,n, \qquad (٢٥)$$

$$S_0^j=0, \quad S_n^j=\psi_S(t_j), \quad P_0^j=0,\ P_n^j=0, \quad j=1,2,....,m. \qquad (٢٦)$$

يمكن حساب خطأ التقريب بطريقة مشـابهة، وبمعنـى آخـر: كـما في حالـة مسـألة القيمة الحدية لمعادلة الانتشار. رتبة التقريب لمجموعة المعادلات التفاضـلية (١٣)، (١٤) بمجموعة معـادلات الفـرق تسـاوي $O(\tau+h^2)$، يـتم اسـتبدال الشـــروط الابتدائية والحدية تماماً.

مخطط الفرق صريح وثنائي الطبقة.

١ , ٤ الحساب لحل The Calculation of a Solution

الحساب لحل مخطط الفرق (٢٣)- (٢٦) مماثل لحساب حل مخطط كرانك- نيكلسون لمسألة القيمة الحدية (٤٥)- (٤٩) في الفصل السابق، ويتم تنفيذ الحساب في طبقة الشبكة المتسلسلة الواحدة تلو الأخرى. في البداية يتم حسـاب الحـل عـلى الطبقة صفر عند $t=0$ باستخدام الشـــروط الابتدائية (٢٥)

$$S_i^0=\varphi_S(x_i), \quad P_i^0=\varphi_P(x_i),\ i=0,1,....,n.$$

بافتراض أن الحلول S_i^j و P_i^j محسوبة في الطبقة $j - th$. هكذا، فإن القيم S_i^j و P_i^j لـ $i = 0, 1, \ldots, n$ تكون معروفة. نمضي في حل معادلات الفرق (٢٣)، (٢٤) الخاضعة لقيم S_i^{j+1} و P_i^{j+1} في الطبقة $j + 1 - th$. نضرب هذه المعادلات بـ τ ويكون لدينا

$$\begin{aligned} S_i^{j+1} &= S_i^j \\ &+ \tau\left(\frac{D_S}{2}\left(\frac{S_{i+1}^{j+1} - 2S_i^{j+1} + S_{i-1}^{j+1}}{h^2} i + \frac{S_{i+1}^j - 2S_i^j + S_{i-1}^j}{h^2}\right)\right. \\ &\left. - \frac{V_{\max} S_i^{j+1}}{K_M + S_i^j}\right), \end{aligned} \tag{٢٧}$$

$$\begin{aligned} P_i^{j+1} &= P_i^j \\ &+ \tau\left(\frac{D_P}{2}\left(\frac{P_{i+1}^{j+1} - 2P_i^{j+1} + P_{i-1}^{j+1}}{h^2} + \frac{P_{i+1}^j - 2P_i^j + P_{i-1}^j}{h^2}\right)\right. \\ &\left. + \frac{V_{\max} S_i^{j+1}}{K_M + S_i^j}\right), \\ & i = 1, 2, \ldots, n-1. \end{aligned} \tag{٢٨}$$

الشروط الحدية في الطبقة $j + 1 - th$ تكون

$$S_0^{j+1} = 0,\ S_n^{j+1} = \psi(t_{j+1}), \quad P_0^{j+1} = 0,\ P_n^{j+1} = 0.$$

هذا يُنتج مجموعة خطية من الرتبة $2n - 2$ فيما يتعلق بالقيم المجهولة S_i^j و P_i^j لـ $i = 0, 1, \ldots, n - 1$. الآن سوف نستمر بحساب قيم التكرار $S_i^{(j+1)}$ و $P_i^{(j+1)}$. إن اختيار الرموز بشكل مناسب قد يبسط التطوير. دعنا نقدم $s_i = S_i^{j+1}$ و $p_i = P_i^{j+1}$، ومن ثم يمكن كتابة مجموعة المعادلتين (٢٧)، (٢٨) كالتالي

$$a_i s_{i-1} - c_i s_i + b_i s_{i+1} = f_i, \qquad (٢٩)$$

$$\overline{a}_i p_{i-1} - \overline{c}_i p_i + \overline{b}_i p_{i+1} = \overline{f}_i, \qquad (٣٠)$$

$$i = 1,2,....,n-1,$$

حيث إن

$$a_i = b_i = \frac{\tau D_S}{2h^2}, \quad c_i = 1 + \tau\left(\frac{D_S}{h^2} + \frac{V_{\max}}{K_M + S_i^j}\right),$$

$$\overline{a}_i = \overline{b}_i = \frac{\tau D_S}{2h^2}, \quad \overline{c}_i = 1 + \tau\left(\frac{D_P}{h^2} - \frac{V_{\max}}{K_M + S_i^j}\right),$$

$$f_i = -S_i^j - \tau D_S \frac{S_{i+1}^j - 2S_i^j + S_{i-1}^j}{2h^2},$$

$$\overline{f}_i = -P_i^j - \tau D_P \frac{P_{i+1}^j - 2P_i^j + P_{i-1}^j}{2h^2},$$

لـ $i = 1,2,....,n-1$.

القيم

$$a_1 = 0,\ b_1 = \frac{\tau D_S}{2h^2}, \quad c_1 = 1 + \tau\left(\frac{D_S}{h^2} + \frac{V_{max}}{2K_M + S_1^j}\right),$$

$$a_{n-1} = \frac{\tau D_S}{2h^2},\ b_{n-1} = 0,\ c_{n-1} = 1 + \tau\left(\frac{D_S}{h^2} + \frac{V_{max}}{2K_M + S_i^j}\right),$$

$$\overline{a}_1 = 0,\ \overline{b}_1 = \frac{\tau D_P}{2h^2},\ \overline{c}_1 = 1 + \tau\left(\frac{D_P}{h^2} - \frac{V_{max}}{K_M + S_1^j}\right),$$

$$\overline{a}_{n-1} = \frac{\tau D_P}{2h^2},\ \overline{b}_{n-1} = 0,\ \overline{c}_{n-1} = 1 + \tau\left(\frac{D_P}{h^2} - \frac{V_{max}}{K_M + S_i^j}\right),$$

$$f_1 = -S_1^j - \tau D_S \frac{S_2^j - 2S_1^j + S_0^j}{2h^2},$$

$$f_{n-1} = -S_{n-1}^j - \tau D_S \frac{S_n^j - 2S_{n-1}^j + S_{n-2}^j + \psi_S(t_{j+1})}{2h^2},$$
$$\bar{f}_1 = -P_1^j - \tau D_P \frac{P_2^j - 2P_1^j + P_0^j}{2h^2},$$
$$\bar{f}_{n-1} = -P_{n-1}^j - \tau D_P \frac{P_n^j - 2P_{n-1}^j + P_{n-2}^j}{2h^2}.$$

كل القيم S_i^j و P_i^j معروفة. لذلك، يمكن حساب معاملات المجموعات (٢٩)، (٣٠) كالتالي

$$a_i, b_i, c_i, f_i, \overline{a}_i, \overline{b}_i, \overline{c}_i, \bar{f}_i.$$

الخطوة التالية هي حل هذه المجموعة (حساب القيم s_i، $\bar{s}_i$ و p_i، $\overline{P}_i$ $i = 1,2,....,n-1,$)، وكما حدث في الحالات السابقة (مخططات فرق كرانك- نيكلسون) سوف نطبق طريقة الحذف لحل مجموعة المعادلات الخطية بمصفوفات ثلاثية قطرية (متغير التدفق الطريقة الحذف). استعداداً لهذا، يمكننا إنشاء المجموعة (٢٩)، (٣٠) بـ

$$\begin{gathered}
s_1 = \beta_1 s_2 + \mu_1, \\
a_i s_{i-1} - c_i s_i + b_i s_{i+1} = f_i, \quad i = 2,3,...,n-2, \\
s_{m-1} = \beta_2 s_{m-2} + \mu_2, \\
p_1 = \overline{\beta}_1 p_2 + \overline{\mu}_1, \\
\overline{a}_i p_{i-1} - \overline{c}_i p_i + \overline{b}_i p_{i+1} = \bar{f}_i, \quad i = 2,3,....,n-2, \\
p_{m-1} = \overline{\beta}_2 p_{m-2} + \overline{\mu}_2,
\end{gathered}$$

حيث إن

$$\beta_1 = b_1 / c_1, \ \ \mu_1 = -f_1 / c_1,$$
$$\beta_2 = a_{n-1} / c_{n-1}, \quad \mu_2 = (f_{n-1} - b_{n-1})\psi(t_{j+1}) / c_{n-1},$$

$$\overline{\beta}_1 = \overline{b}_1 / \overline{c}_1, \quad \overline{\mu}_1 = -\overline{f}_1 / \overline{c}_1,$$
$$\overline{\beta}_2 = \overline{a}_{n-1} / \overline{c}_{n-1}, \quad \overline{\mu}_2 = \overline{f}_{n-1} / \overline{c}_{n-1}.$$

من أجل حل هذه المجموعات يمكننا تطبيق طريقة الحذف (٢٨) – (٣٨).

علاوة على ذلك، وبشكل مشابه، سوف نجد الحلول S_i^j و P_i^j على الطبقة التالية وسوف نستمر حتى نصل إلى الطبقة الأخيرة $t = t_m$.

٢ , ٤ التقارب والاستقرار The Convergence and the Stability

إن طريقة كرانك– نيكلسون الخطية مستقرة دون قيدٍ أو شرطٍ وتتقارب بالمعدل $o(\tau + h^2)$.

٥ – قانون حفظ الكتلة Law of Conservation of Mass

سوف نناقش قوانين الحفظ الآن. حيث إنها تلعب دوراً مهماً في العديد من عمليات تفاعل الانتشار. العمليات الكيميائية في الحساس الحيوي تتبع بعض قوانين حفظ الكتلة. الآن سوف ندرس مثالاً عن قانون حفظ بسيط لمسألة تفاعل الانتشار اللاخطي

$$\frac{\partial S}{\partial t} = D_S \frac{\partial^2 S}{\partial x^2} - \frac{V_{\max} S}{K_M + S}, \qquad (٣١)$$

$$\frac{\partial P}{\partial t} = D_P \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} + \frac{V_{\max} S}{K_M + S}, \qquad (٣٢)$$

في مستطيل $Q = \{0 < x < d, \quad 0 < t \le T\}$ بالشروط الابتدائية .

$$\mathrm{S}(0,\mathrm{x}) = 0, \ \mathrm{x} \in [0,\mathrm{d}), \ \mathrm{S}(0,\mathrm{d}) = \mathrm{S}_0, \quad \mathrm{P}(0,\mathrm{x}) = 0, \ \mathrm{x} \in [0,\mathrm{d}]. \qquad (٣٣)$$

والشروط الحدية

$$S(0,t)=0,\ S(d,t)=0,\ P(0,t)=0,\ \frac{\partial P(d,t)}{\partial x}=0,\ t\in[0,T]. \quad (٣٤)$$

سوف نلخص الآن هذه المجموعة من المعادلات، وبعد ذلك سوف نجري التكامل على المنطقة $Q_{\bar{t}}=\{0\le x\le d,\ 0\le t\le \bar{t}\le T\}$. وباستخدام الشروط الابتدائية والحدية، نحصل على

$$\int_0^d (S(x,\bar{t})+P(x,\bar{t}))dx = \int_0^{\bar{t}} D_S\frac{\partial S(d,t)}{\partial x}dt-\int_0^{\bar{t}}\left(D_S\frac{\partial S(0,t)}{\partial x}+D_P\frac{\partial P(0,t)}{\partial x}\right)dt. \quad (٣٥)$$

إن الحد

$$\int_0^d (S(x,\bar{t})+P(x,\bar{t}))dx$$

يصف الكمية لكتلة الركيزة $S(x,t)$ والناتج $P(x,t)$ عند الزمن $t=\bar{t}$، والحد

$$\int_0^{\bar{t}} D_S\frac{\partial S(d,t)}{\partial x}dt$$

يصف مقدار كتلة ركيزة التدفق الداخل inflowing، والحد

$$\int_0^{\bar{t}}\left(D_S\frac{\partial S(0,t)}{\partial x}+D_P\frac{\partial P(0,t)}{\partial x}\right)dt$$

يصف مقدار كتلة الناتج والركيزة المتدفقة.

يقال إن مخطط الفرق، الذي يعبر عن قانون الحفظ على الشبكة، محافظ conservative أو متباعد divergent. للمخطط المحافظ، أن يتبع القانون ذا الصلة للحفظ في كامل مجال الشبكة $Q_{t_1,\tau h}$ كمعادلة فرق طبيعية جبرية. لمخططات

كرانك- نيكلسون اللاخطية والخطية (١٧)- (٢٠)، (٢٣)- (٢٦) هي أمثلة على المخططات المحافظة. هنا سوف نقوم بدراسة مخطط كرانك- نيكلسون اللاخطي فقط (١٧)- (٢٠).

$$\frac{S_i^{j+1}-S_i^j}{\tau}= \frac{D_S}{2}\left\{\frac{S_{i+1}^{j+1}-2S_i^{j+1}+S_{i-1}^{j+1}}{h^2}+\frac{S_{i+1}^{j}-2S_i^{j}+S_{i-1}^{j}}{h^2}\right\} -\frac{V_{\max}(S_i^j+S_i^{j+1})/2}{K_M+(S_i^j+S_i^{j+1})/2},$$

$$\frac{P_i^{j+1}-P_i^j}{\tau}= \frac{D_P}{2}\left\{\frac{P_{i+1}^{j+1}-2P_i^{j+1}+P_{i-1}^{j+1}}{h^2}+\frac{P_{i+1}^{j}-2P_i^{j}+P_{i-1}^{j}}{h^2}\right\} -\frac{V_{\max}(S_i^j+S_i^{j+1})/2}{K_M+(S_i^j+S_i^{j+1})/2},$$

$$i=1,2,....,n-1,\quad j=0,1,.....,m-1,$$

بالشروط الابتدائية والحدية

$$S_i^0=\varphi_S(x_i),\ \ P_i^0=\varphi_P(x_i),\ \ i=0,1,....,n.$$

$$S_0^j=0,\ \ S_n^j=S_0,\ \ P_0^j=0,\ \ P_n^j=P_{n-1}^j,\quad j=1,2,....,m.$$

سوف نجمع الآن هذه المجموعة من المعادلات وبعد ذلك، سوف نجمعها فيما يتعلق بـ i، j في المنطقة $Q_{\bar{\tau},\tau h}$. بعد إعادة بناء بسيط يمكن للمرء أن يحصل على المساواة

$$\sum_{i=1}^{n-1} h(S_i^{\bar{j}} - P_i^{\bar{j}}) = \frac{1}{2}\left(\sum_{j=1}^{\bar{j}} hD_S \frac{S_n^j - S_{n-1}^j}{h} - \sum_{j=1}^{\bar{j}} h\left(D_S \frac{S_1^j - S_0^j}{h} + D_P \frac{P_1^j - P_0^j}{h}\right)\right), \tag{٣٦}$$

حيث إن $\bar{t} = \bar{j}\tau$. هذه المساواة نظير لشبكة قانون الحفظ (٣٥). وبناءً على ذلك، فإن مخطط فرق كرانك- نيكلسون اللاخطي يكون محافظاً وفقاً لنظير الشبكة الأخيرة لقانون الحفظ. تضمن المساواة (٣٦) بأن مجموع الركيزة والناتج سوف يخضع في كل لحظة من الزمن $\bar{t}$ لقانون حفظ الكتلة.

٦ – طريقة الاتجاهات المتناوبة Te Alternating Directions Method

الآن نبدأ بدراسة مسألة تفاعل الانتشار على المستوى. يتم وصف عمل الحساس الحيوي من قبل مسألة القيمة الحدية

$$\frac{\partial S}{\partial t} = D_S\left(\frac{\partial^2 S}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 S}{\partial y^2}\right) - \frac{V_{\max} S}{K_M + S}, \tag{٣٧}$$

$$\frac{\partial P}{\partial t} = D_P\left(\frac{\partial^2 P}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 P}{\partial y^2}\right) + \frac{V_{\max} S}{K_M + S}, \tag{٣٨}$$

في مستطيل $Q = \{(x,y) \in \Omega,\ 0 < t \le T\}$، حيث $\Omega = \{0 < x < d_x,\ 0 < y < d_y\}$

بالشروط الابتدائية لـ $t = 0$

$$S(x,y,0) = \varphi_S(x,y),\ \ P(x,y,0) = \varphi_P(x,y),\ \ (x,y) \in \overline{\Omega} \tag{٣٩}$$

والشروط الحدية

$$S(x,y,t) = \psi_S(x,y,t),\ P(x,y,t) = \psi_P(x,y,t),\ \ (x,y) \in \partial\Omega\ t \in [0,T]. \tag{٤٠}$$

هنـا $\varphi_S(x,y)$، و $\varphi_P(x,y)$، و $\psi_S(x,y,t)$ و $\psi_P(x,y,t)$ هـي الـدوال المعطـاة. يتكون الحد $\partial\Omega$ من حد المستطيل Ω، من أجل التبسيط أخذنا الشـروط الابتدائية والحدية من الشكل العام.

تنتمـي طريقـة الاتجاهـات المتناوبـه (مخطـط يُنسـب إلى بيسـمان Peaceman وراتشفورد Rachford) إلى الطرق الشعبية لحل المسائل في الفضاء ثنائي الأبعاد لمعادلات الانتشار. إحدى أهم القضايا في الطرق العددية هي الاختيـار الموثـوق للخوارزميـات الحسابية، وتحقيق الأمر الذي يتطلب الحد الأدنى من زمن التنفيذ لإعطاء حـل تقريبـي بالدقة المقررة. العدد الكلي للعمليات الحسابية اللازمة للقيام بذلك هي السـمة الرئيسـة للخوارزميات موضع السؤال، ونظراً لأن، الخصائص الأخـرى، مثـل نوعيـة الـبرامج ذات الصلة، وتوافر أجهزة كمبيوتر هندسية متقدمة تكون خارجة عن أرادتنا. في ضـوء ذلك، فإن متطلبات الاقتصاد تصبح أمراً ملحاً ومهماً للغاية لاسـيما في الحلـول العدديـة للمسائل متعددة الأبعاد الناشئة مراراً وتكراراً، وخصوصاً في المجـالات ذات الهندسـة المعقدة. الاتجاه المتناوب هو مخطط اقتصـادي. التعريـف الكـلي للمخطـط الاقتصـادي يعني أن كمية العمليات الحسابية، الضرورية لحساب قيم الحل تتناسب مع عـدد نقـاط الشبكة. الفكرة الرئيسة لطريقة الاتجاه المتناوب هي تحويـل المسـألة في فضـاء ثنـائي الأبعاد إلى مسألتين أحادية الأبعاد. يـتم وضـع القـيم الحاليـة S_{ik}^{j}، P_{ik}^{j} و S_{ik}^{j+1}، P_{ik}^{j+1} لمخطط الفرق هذا مع القيم المتوسـطة $S_{ik}^{j+1/2}$، $P_{ik}^{j+1/2}$ معالجـة رسـمية التـي منهـا القيمــة S، P في الزمن $t=t_{j+1/2}=t_j+\tau/2$. الممكن أن يتم الانتقال من الطبقـة $j-th$ إلى الطبقة $j+1-th$ في خطوتين بمسافة فصل ملائمة 0.5τ.

$$\frac{S_{ik}^{j+1/2}-S_{ik}^{j}}{0.5\tau}= D_S\left(\frac{S_{i+1,k}^{j+1/2}-2S_{ik}^{j+1/2}+S_{i-1,k}^{j+1/2}}{h_x^2}+\frac{S_{i,k+1}^{j}-2S_{ik}^{j}+S_{i,k-1}^{j}}{h_y^2}\right)-\frac{V_{\max}S_{ik}^{j+1/2}}{K_M+S_{ik}^{j}}, \tag{٤١}$$

$$\frac{P_{ik}^{j+1/2}-P_{ik}^{j}}{0.5\tau}= D_P\left(\frac{P_{i+1,k}^{j+1/2}-2P_{ik}^{j+1/2}+P_{i-1,k}^{j+1/2}}{h_x^2}+\frac{P_{i,k+1}^{j}-2P_{ik}^{j}+P_{i,k-1}^{j}}{h_y^2}\right)+\frac{V_{\max}S_{ik}^{j+1/2}}{K_M+S_{ik}^{j}}, \tag{٤٢}$$

$$\frac{S_{ik}^{j+1}-S_{ik}^{j+1/2}}{0.5\tau}= D_S\left(\frac{S_{i+1,k}^{j+1/2}-2S_{ik}^{j+1/2}+S_{i-1,k}^{j+1/2}}{h_x^2}+\frac{S_{i,k+1}^{j+1}-2S_{ik}^{j+1}+S_{i,k-1}^{j+1}}{h_y^2}\right)-\frac{V_{\max}S_{ik}^{j+1}}{K_M+S_{ik}^{j}}, \tag{٤٣}$$

$$\frac{P_{ik}^{j+1/2}-P_{ik}^{j+1}}{0.5\tau}= D_P\left(\frac{P_{i+1,k}^{j+1/2}-2P_{ik}^{j+1/2}+P_{i-1,k}^{j+1/2}}{h_x^2}+\frac{P_{i,k+1}^{j+1}-2P_{ik}^{j+1}+P_{i,k-1}^{j+1}}{h_y^2}\right)+\frac{V_{\max}S_{ik}^{j+1}}{K_M+S_{ik}^{j}}, \tag{٤٤}$$

$$i=1,2,\dots,n_x-1,\quad k=1,2,\dots,n_y-1,\quad j=0,1,\dots,m-1.$$

دعنا نؤكد هنا أن المخطط الأول ضمني على طول الاتجاه x،وصريح على طول الاتجاه y، بينما يكون المخطط الثاني ضمنياً على طول الاتجاه y، وصريحًا على طول الاتجاه x. ويتم استكمال المعادلات (٤١)- (٤٤) بالشروط الابتدائية

$$S_{ik}^{0}=S_0(x_i,y_k),\quad P_{ik}^{0}=P_0(x_i,y_k),\quad i=0,1,\dots,n_x,\quad k=0,1,\dots,n_y \tag{٤٥}$$

وشـــروط الفرق الحدية من نوع خاص

$$S_{ik}^{j+1} = S_0(x_i, y_k), \quad P_{ik}^{j+1} = P_0(x_i, y_k), \tag{٤٦}$$

لـ $k = 0$ و $k = n_y$، $i = 0, 1, \ldots, n_x$.

$$S_{ik}^{j+1/2} = S_0(x_i, y_k), \quad P_{ik}^{j+1/2} = P_0(x_i, y_k), \tag{٤٧}$$

لـ $i = 0$ و $i = n_x$، $k = 0, 1, \ldots, n_y$.

١ , ٦ الحساب لحل The Calculation of a Solution

يجرى الحســـاب في طبقة الشبكة المتسلسلة الواحـدة تلـو الأخـرى. الآن، لـتكن الحلـول S_{ik}^j و P_{ik}^j محســـوبة في الطبقـة *j-th*. نتحـــرك عـلى طـول الصفوف $k=0, 1,..,n_y-1$ لحل (٤١)- (٤٢) بطريقة الحذف، الذي يسمح لنا بتحديد القيم $S_{ik}^{j+1/2}$ و $P_{ik}^{j+1/2}$ على كل عقد الشبكة. بعد أن نتحـــرك على طول أعمـــدة $i = 0, 1, \ldots, n_x-1$ في محاولة لحل (٤٣)، (٤٤)، وإيجاد القيم S_{ik}^{j+1} و P_{ik}^{j+1}. يتم تبنـي نفس الإجراءات في الانتقـال مـن الطبقـة $(n+1)th$ إلى الطبقـة $(n+2)th$، وهكـذا تحدث طرق الاتجاهات المتناوبه.

إن الخوارزمية التي تم وضعها للتو اقتصادية، لأن عدد العمليـات الحسـابية يتناسب مع عدد عقد الشبكة.

٢ , ٦ التقارب والاستقرار The Convergence and the Stability

طريقة الاتجاهات المتناوبة مستقرة دون قيدٍ أو شـــرطٍ وتتقارب مع المعدل $O(\tau + h^2)$.

٧ – الطريقة الصريحة للمسائل متعددة الأبعاد

The Explicit Method for the Multidimensional Problems

نبدأ الآن بدراسة مسألة تفاعل الانتشار على موازي السطوح. يتم وصف عمل الحساس الحيوي بواسطة مسألة القيمة الحدية

$$\frac{\partial S}{\partial t} = D_S\left(\frac{\partial^2 S}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 S}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 S}{\partial z^2}\right) - \frac{V_{\max} S}{K_M + S}, \tag{٤٨}$$

$$\frac{\partial P}{\partial t} = D_P\left(\frac{\partial^2 P}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 P}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 P}{\partial z^2}\right) + \frac{V_{\max} S}{K_M + S}, \tag{٤٩}$$

في مستطيل $Q = \{(x,y,z) \in \Omega, 0 < t \le T\}$، حيث إن $\Omega = \{0 < x < d_x,\ 0 < y < d_y,\ 0 < z < d_z\}$ بالشروط الابتدائية لـ $t = 0$

$$S(x,y,z,0) = \varphi_S(x,y,z),\ P(x,y,z,0) = \varphi_P(x,y,z),\ (x,y,z) \in \overline{\Omega} \tag{٥٠}$$

والشروط الحدية

$$\begin{aligned} &S(x,y,z,t) = \psi_S(x,y,z,t), \quad P(x,y,z,t) = \psi_P(x,y,z,t), \\ &(x,y,z) \in \partial\Omega, \quad t \in [0,T]. \end{aligned} \tag{٥١}$$

هنا $\varphi_S(x,y,z)$، $\varphi_P(x,y,z)$، $\psi_S(x,y,z,t)$ و $\psi_P(x,y,z,t)$ هي الدوال المعطاة. والحد $\partial\Omega$ يتكون من حد موازي السطوح Ω. من أجل التبسيط أخذنا الشروط الابتدائية والحدية للشكل العام.

سنعمل الآن على وصف الطريقة الصريحة لحل مجموعة معادلات تفاعل الانتشار.

يتمتع مخطط الفرق الصريح لحل مجموعة معادلات تفاعل الانتشار بشعبية بين المتخصصين. السبب الرئيس لذلك هو بساطة التحقيق العددي. نقدم شبكة

بخطوات τ على طول المحور t و h_x، h_y و h_z على طول المحاور x، y و z على الترتيب.

$$\overline{Q}_{h_x,h_y,h_z,\tau} = \{(x_i, y_k, z_l, t_j) : x_i = ih_x,\ i = 0,1,\dots,n_x,\ h_x n_x = d_x;$$
$$y_k = kh_y,\ k = 0,1,\dots,n_y,\ h_y n_y = d_y;$$
$$z_l = lh_z,\ l = 0,1,\dots,n_z,\ h_z n_z = d_z;\ t_j = j\tau,\ j = 0,1,\dots,m,\ \tau m = T\}.$$

الآن يتم تقريب مجموعة التفاعل ومعادلات الانتشار بمجموعة معـادلات الفرق الصريحة.

$$\frac{S_{i,k,l}^{j+1} - S_{i,k,l}^{j}}{\tau} = D_S\left(\frac{S_{i+1,k,l}^{j} - 2S_{i,k,l}^{j} + S_{i-1,k,l}^{j}}{h_x^2} + \frac{S_{i,k+1,l}^{j} - 2S_{i,k,l}^{j} + S_{i,k-1,l}^{j}}{h_y^2} + \frac{S_{i,k,l+1}^{j} - 2S_{i,k,l}^{j} + S_{i,k,l-1}^{j}}{h_z^2}\right) - \frac{V_{\max} S_{i,k,l}^{j}}{K_M + S_{i,k,l}^{j}}, \tag{٥٢}$$

$$\frac{P_{i,k,l}^{j+1} - P_{i,k,l}^{j}}{\tau} = D_P\left(\frac{P_{i+1,k,l}^{j} - 2P_{i,k,l}^{j} + P_{i-1,k,l}^{j}}{h_x^2} + \frac{P_{i,k+1,l}^{j} - 2P_{i,k,l}^{j} + P_{i,k-1,l}^{j}}{h_y^2} + \frac{P_{i,k,l+1}^{j} - 2P_{i,k,l}^{j} + P_{i,k,l-1}^{j}}{h_z^2}\right) + \frac{V_{\max} S_{i,k,l}^{j}}{K_M + S_{i,k,l}^{j}}, \tag{٥٣}$$

$$i = 1,2,\dots,n_x - 1,\quad k = 1,2,\dots,n_y - 1,\quad l = 1,2,\dots,n_z - 1,\ j = 0,1,\dots,m-1.$$

يتم تحديد الشروط الابتدائية بشكل صريح

$$S_{i,k,l}^{0} = \varphi_S(x_i, y_k, z_l),\ P_{i,k,l}^{0} = \varphi_P(x_i, y_k, z_l), \tag{٥٤}$$

$$i = 0,1,\dots,n_x,\quad ,k = 0,1,\dots,n_y,\quad l = 0,1,\dots,n_z,$$

والشـروط الحدية

$$S_{i,k,l}^{j} = \psi_S(x_i, y_k, z_l, t_j),\quad P_{i,k,l}^{j} = \psi_P(x_i, y_k, z_l, t_j). \tag{٥٥}$$

حيث تنتمي النقاط (x_i, y_k, z_l) إلى الحد $\partial\Omega$ و:

$$i=0,\ n_x,\quad k=0,1,\dots,n_y,\quad l=0,1,\dots,n_z.$$

$$k=0,\ n_y,\quad i=0,1,\dots,n_x,\quad l=0,1,\dots,n_z,$$
$$l=0,\ n_z,\quad i=0,1,\dots,n_x,\quad k=0,1,\dots,n_y.$$

أطَّرت مجموعة معادلات الفرق مع الشروط الحدية والابتدائية مخطط الفرق الصريح (٥٢)- (٥٥). هذا المخطط ثنائي الطبقة. يحتوي النمط على سبع نقاط (x_{i+1}, y_k, z_l, t_j) ، (x_i, y_k, z_l, t_j) ، (x_{i-1}, y_k, z_l, t_j) ، (x_i, y_{k+1}, z_l, t_j) ، (x_i, y_{k-1}, z_l, t_j) ، (x_i, y_k, z_{l+1}, t_j) ، (x_i, y_k, z_{l-1}, t_j) و (x_i, y_k, z_l, t_{j+1}). كما في حالة الفضاء أحادي البعد السابقة يمكن أن نثبت بأن خطأ التقريب يكون من الرتبة $O(\tau+h_x^2+h_y^2+h_z^2)$. والآن سوف نستمر بحساب حل مخطط الفرق (٥٢)- (٥٥).

١ , ٧ الحساب لحل The Calculation of a Solution

حساب حل مخطط الفرق (٥٢)- (٥٥) مماثل لحساب حل المخططات الصريحة السابقة. يتم الحساب في طبقة الشبكة المتسلسلة الواحدة تلو الأخرى. في البداية يتم حساب الحل على الطبقة صفر عند $t = 0$ باستخدام الشروط الابتدائية (٥٤).

الآن، لتكن الحلول $S_{i,k,l}^j$ و $P_{i,k,l}^j$ محسوبة في الطبقة *j-th*. نمضي في حل معادلات الفرق (٥٢)، (٥٣) الخاضعة للقيم $S_{i,k,l}^j$ و $P_{i,k,l}^j$ في الطبقة *j +1– th*. يكون لدينا

$$S_{i,k,l}^{j+1} = S_{i,k,l}^{j} + \tau D_S \left(\frac{S_{i+1,k,l}^{j} - 2S_{i,k,l}^{j} + S_{i-1,k,l}^{j}}{h_x^2} + \frac{S_{i,k+1,l}^{j} - 2S_{i,k,l}^{j} + S_{i,k-1,l}^{j}}{h_y^2} + \frac{S_{i,k,l+1}^{j} - 2S_{i,k,l}^{j} + S_{i,k,l-1}^{j}}{h_z^2} \right) - \tau \frac{V_{\max} S_{i,k,l}^{j}}{K_M + S_{i,k,l}^{j}},$$

$$P_{i,k,l}^{j+1} = P_{i,k,l}^{j} + \tau D_P \left(\frac{P_{i+1,k,l}^{j} - 2P_{i,k,l}^{j} + P_{i-1,k,l}^{j}}{h_x^2} + \frac{P_{i,k+1,l}^{j} - 2P_{i,k,l}^{j} + P_{i,k-1,l}^{j}}{h_y^2} + \frac{P_{i,k,l+1}^{j} - 2P_{i,k,l}^{j} + P_{i,k,l-1}^{j}}{h_z^2} \right) - \tau \frac{V_{\max} S_{i,k,l}^{j}}{K_M + S_{i,k,l}^{j}},$$

$$i = 1,2,\dots,n_x - 1, \quad k = 1,2,\dots,n_y - 1, \quad l = 1,2,\dots,n_z - 1.$$

كل قيم الدوال $S_{i,k,l}^{j}$ و $P_{i,k,l}^{j}$ تكون معروفة على الجانب الأيمن من المتساوية. لذا نستطيع حساب القيم $S_{i,k,l}^{j+1}$ من المعادلة الأولى.

$$i = 1,2,\dots,n_x - 1, \quad k = 1,2,\dots,n_y - 1, \quad l = 1,2,\dots,n_z - 1.$$

ومن ثم، وبناءً على ذلك، قيم $P_{i,k,l}^{j+1}$ من المعادلة الثانية لـ

$$i = 1,2,\dots,n_x - 1, \quad k = 1,2,\dots,n_y - 1, \quad l = 1,2,\dots,n_z - 1.$$

يتم حساب القيم المتبقية S_{ik}^{j+1} و P_{ik}^{j+1} على الحد باستخدام الشروط الحدية (٥٥). علاوة على ذلك، وبشكل مشابه، سوف نجد الحلول $S_{i,k,l}^{j+2}$ و $P_{i,k,l}^{j+2}$ على الطبقة التالية، وسوف نستمر حتى نصل إلى الطبقة الأخيرة $t = t_m$. إن الخوارزمية التي تم وصفها للتو اقتصادية، لأن عدد العمليات الحسابية يتناسب مع عدد عقد الشبكة.

٢ , ٧ التقارب والاستقرار The Convergence and the Stability

الطريقة الصريحة مستقرة بشكل مشروط وتتقارب مع المعدل $O(\tau+h_x^2+h_y^2+h_z^2)$. المعادلات التفاضلية غير خطية ومن الممكن صياغة شروط استقرار كافية

$$\frac{\tau \max\{D_S, D_P\}}{\min\{h_x^2, h_y^2, h_z^2\}} \le 1/12, \qquad \frac{\tau V_{\max}}{K_M} \le 1/2.$$

المراجع

References

1. Adamatzky A, De Lacy Costello B, Asai T (2005) Reaction-diffusion computers, Elsevier, Amsterdam
2. Amatore C, Szunerits S, Thouin L, Warkocz J-S (2001) The real meaning of Nernst's steady diffusion layer concept under non-forced hydrodynamic conditions. A simple model based on Levich's seminal view of convection. J Electroanal Chem 500:62
3. Amatore C, Oleinick AI, Svir I (2006) Construction of optimal quasi-conformal mappings for the 2d-numerical simulation of diffusion at microelectrodes. Part 1: Principle of the method and its application to the inlaid disk microelectrode. J Electroanal Chem 597:69
4. Amatore C, Oleinick A, Klymenko OV et al (2008) Theory and simulation of diffusion reaction into nano- and mesoporous structures. Experimental application to sequestration of mercury(II). Anal Chem 80:3229
5. Ames WF (1977) Numerical methods for partial differential equations, 2nd edn. Academic, New-York
6. Amine A, Kauffmann JM, Patriarche GJ (1991) Long-term operational stability of a mixed glucose oxidase-redox mediator-carbon paste electrode. Anal Lett 24:1293
7. Amine A, Kauffmann JM, Guilbault GG (1993) Characterization of mixed enzyme-mediator carbon paste electrodes. Anal Lett 26:1281
8. Antiochia R, Lavagnini I, Magno F (2004) Amperometric mediated carbon nanotube paste biosensor for fructose determination. Anal Let 37:1657
9. Arshak K, Jafer E, McDonagh D (2007) Modeling and simulation of a wireless microsensor data acquisition system using PCM techniques. Simul Model Pract Th 15:764
10. Aris R (1975) The mathematical theory of diffusion and reaction in permeable catalysts. The theory of the steady state. Clarendon, Oxford

11. Artursson T, Eklöv T, Lundström I et al (2000) Drift correction for gas sensors using multivariatemethods. J Chemometrics 14:711
12. Babushka I, Pager M, Vitasek E (1966) Numerical processes in differential equations. Wiley, Chichester
13. Bacha S, Bergel A, ComtatM(1995) Transient response of multilayer electroenzymic biosensors. Anal Chem 67:1669
14. Bacha S, Montagne M, Bergel A (1996) Modeling mass transfer with enzymatic reaction in electrochemical multilayer microreactors. AICHE J 42:2967
15. 15. Bacon NC, Hall EAH (1999) A sandwich enzyme electrode giving electro- chemical scavenging of interferents. Electroanal 11:749
16. Baeumner AJ, Jones C, Wong CY, Price A (2004) A generic sandwich-type biosensor with nanomolar detection limits. Anal Bioanal Chem 378:1587
17. Baldini F, Chester AN, Homola J, Martellucci S (2006) Optical chemical sensors. Springer, Amsterdam
18. Bakhvalov NS, Panasenko GP (1989) Homogenization: averaging processes in periodic media. Kluwer, Dordrecht
19. Bard AJ, Faulkner LR (2001) Electrochemical methods. Fundamentals and applications, 2nd edn. Wiley, New York
20. Barnaby W (1997) Biological weapons: an increasing threat. Med Confl Surviv 13:301
21. Baronas R, Ivanauskas F, Kulys J (1998) Modeling of a microreactor on heterogeneous surface and an influence of geometry to microreactor operation. Nonlinear Anal Model Contr 3:19
22. Baronas V, Ivanauskas F, Kulys J (1999) Modeling a biosensor based on the heterogeneous microreactor. J Math Chem 25:245
23. Baronas R, Ivanauskas F, Survila A (2000) Simulation of electrochemical behavior of partially blocked electrodes under linear potential sweep conditions. J Math Chem 27:267
24. Baronas R, Ivanauskas F, Kulys J (2002) Modelling dynamics of amperometric biosensors in batch and flow injection analysis. J Math Chem 32:225
25. Baronas R, Christensen J, Ivanauskas F, Kulys J (2002) Computer simulation of amperometric biosensor response to mixtures of compounds. Nonlinear Anal Model Contr 7:3
26. Baronas R, Ivanauskas F, Kulys J (2003) Computer simulation of the response of amperometric biosensors in stirred and non stirred solution. Nonlinear Anal Model Contr 8:3
27. Baronas R, Ivanauskas F, Kulys J (2003) The influence of the enzyme membrane thickness on the response of amperometric biosensors. Sensors 3:248
28. Baronas R, Ivanauskas F, Kulys J, Sapagovas M(2003) Modeling of amperometric biosensors with rough surface of the enzyme membrane. J Math Chem 34:227

29. Baronas R, Kulys J, Ivanauskas F (2004) Modeling amperometric enzyme electrode with substrate cyclic conversion. Biosens Bioelectron 19:915
30. Baronas R, Ivanauskas F, Kulys J (2004) The effect of diffusion limitations on the response of amperometric biosensors with substrate cyclic conversion. J Math Chem 35:199
31. Baronas R, Ivanauskas F, Maslovskis R, Vaitkus P (2004) An analysis of mixtures using amperometric biosensors and artificial neural networks. J Math Chem 36:281
32. Baronas R, Kulys J, Ivanauskas F (2004) Mathematical model of the biosensors acting in a trigger mode. Sensors 4:20
33. Baronas R, Ivanauskas F, Kulys J, Sapagovas M (2004) Computational modeling of a sensor based on an array of enzyme microreactors. Nonlinear Anal Model Contr 9:203
34. Baronas R, Ivanauskas F, Kulys J (2005) Modelling biosensors with perforated membrane. Lith Math J 45(spec issue):449
35. Baronas R, Kulys J, Ivanauskas F (2006) Computational modeling of biosensors with perforated and selective membranes. J Math Chem 39:345
36. Baronas R, Ivanauskas F, Kulys J (2006) Mathematical modeling of biosensors based on an array of enzyme microreactors. Sensors 6:453
37. Baronas R, Ivanauskas F, Kaunietis I, Laurinavicius V (2006) Mathematical modeling of plate-gap biosensors with an outer porous membrane. Sensors 6:727
38. Baronas R, Ivanauskas F, Maslovskis R et al (2007) Locally weighted neural networks for an analysis of the biosensor response. Kybernetika 43:21
39. Baronas R, Ivanauskas F, Kulys J (2007) Computational modeling of the behaviour of potentiometric membrane biosensors. J J Math Chem 42:321
40. Baronas R, Gaidamauskaite E, Kulys J (2007)Modeling a peroxidase-based optical biosensor. Sensors 7:2723
41. Baronas R, Ivanauskas F, Kulys J (2007) Computational modeling of amperometric enzyme electrodes with selective and perforated membranes. In: Simos TE, Maroulis G (ed) Computation in modern science and engineering: proceedings of the international conference on computational methods in science and engineering 2007 (ICCMSE 2007), vol 2, parts A and B. AIP Press, pp 457–460
42. Baronas R, Kulys J (2008) Modeling amperometric biosensors based on chemically modified electrodes. Sensors 8:4845
43. Bartlett PN,Whitaker RG (1987) Electrochemical immobilization of enzymes. Part 1. Theory. J Electroanal Chem 224:27
44. Bartlett PN, Pratt KFE (1993) Modelling of processes in enzyme electrodes. Biosens Bioelectron 8:451
45. Bartlett PN, Pratt KFE (1995) Theoretical treatment of diffusion and kinetics in amperometric immobilized enzyme electrodes Part I: Redox mediator entrapped within the film. J Electroanal Chem 397:61

46. Bartlett PN, Birkin PR, Wallace ENK (1997) Oxidation of β-nicotinamide adenine dinucleotide (NADH) at poly(aniline)-coated electrodes. J Chem Soc, Faraday Trans 93:1951
47. Bergel A, Comtat M (1984) Theoretical evaluation of transient responses of an amperometric enzyme electrode. Anal Chem 56:2904
48. Bertram R, Pernarowski M (1998) Glucose diffusion in pancreatic islets of Langerhans. Biophys J 74:1722
49. Bieniasz LK, Britz D (2004) Recent developments in digital simulation of electroanalytical experiments. Polish J Chem 78:1195
50. Bindra DS, Zhang Y, Wilson GS et al (1991) Design and in vitro studies of a needle-type glucose sensor for subcutaneous monitoring. Anal Chem 63:1692
51. Blaedel WJ, Kissel TR, Boguslaski RC (1972) Kinetic behavior of enzymes immobilized in artificial membranes. Anal Chem 44:2030
52. Blaedel WJ, Boguslaski RC (1978) Chemical amplification in analysis: a review. Anal Chem 50:1026
53. Bosch ME, S´anchez AJR, Rojas FS, Ojeda CB (2007) Recent development in optical fiber biosensors. Sensors 7:797
54. Boujtita E, el Murr N (2006) Biosensors for analysis of ethanol in food. J Food Sci 60:201
55. Briggs GE, Haldane JBS (1925) A note on the kinetics of enzyme action. Biochem J 19:338
56. Britz D (2005) Digital simulation in electrochemistry, 3rd edn. Springer, Berlin
57. Bro R (2003) Multivariate calibration: What is in chemometrics for the analytical chemist? Anal Chim Acta 500:185
58. Bruice TC (2006) Computational approaches: reaction trajectories, structures, and atomic motions. Enzyme reactions and proficiency. Chem Rev 106:3119
59. Buerk DG (1995) Biosensors: theory and applications. CRC Press, Lancaster
60. Cambiaso A, Delfino L, Grattarola M et al (1996) Modeling and simulation of a diffusion limited glucose biosensor. Sensor Actuat B-Chem 33:203
61. Carr PW (1977) Fourier analysis of the transient response of potentiometric enzyme electrodes. Anal Chem 49:799
62. Carr PW, Bowers LD (1980) Immobilized enzymes in analytical and clinical chemistry.Wiley, New York
63. Castillo J, Bl¨ochl A, Dennison S et al (2005) Glutamate detection from nerve cells using a planar electrodes array integrated in a microtiter plate. Biosens Bioelectron 20:2116
64. Cenas NK, Kulys JJ (1981) Biocatalytic oxidation of glucose on the conductive charge transfer complexes. Bioelectrochem Bioenerg 8:103
65. Chaplin MF, Bucke C (1990) Enzyme technology. Cambridge University Press, Cambridge
66. Chaubey A, Malhotra BD (2002) Mediated biosensors. Biosens Bioelectron 17:441

67. Chen LC, Tseng KS, Ho KC (2006) General kinetic model for amperometric sensors based on Prussian blue mediator and its analogs: Application to cysteine detection. Electroanal 18:1313
68. Choi MMF (2004) Progress in enzyme-based biosensors using optical transducers. Microchimica Acta 148:107
69. Clarc LC, Lyons C (1962) Electrode system for continuous monitoring in cardiovascular surgery. Ann N Y Acad Sci 102:29
70. Coche-Guerente L, Labbe P, Mengeaud V (2001) Amplification of amperometric biosensor responses by electrochemical substrate recycling. 3. Theoretical and experimental study of the phenol-polyphenol oxidase system immobilized in Laponite hydrogels and layer-by-layer self-assembled structures. Anal Chem 73:3206
71. Corcuera JRD, Cavalieri R, Powers J, Tang J (2004) Amperometric enzyme biosensor optimization using mathematical modeling. In: Proceedings of the 2004 ASAE/Csae Annual International Meeting, Paper No. 047030 American Society of Agricultural Engineers, Ottawa
72. Cornish-Bowden A (2004) Fundamentals of enzyme kinetics, 3rd edn. Portland Press, London
73. Crank J (1975) The mathematics of diffusion, 2nd edn. Clarendon, Oxford
74. Della Ciana L, Bernacca G, Bordin F et al (1995) Highly sensitive amperometric measurement of alkaline phosphatase activity with glucose oxidase amplification. J Electronal Chem382:129
75. Deslous C, Gabrielli C, Keddam M et al (1997) Impedance techniques at partially blocked electrodes by scale deposition. Electrochim Acta 42:1219
76. Devaux R, Bergel A, Comtat M (1995) Mass transfer with chemical reaction in thin-layer electrochemical reactors. AICHE J 41:1944
77. Devlin JP (ed) (1997) High throughput screening. Marcel Dekker, New York
78. Diamond D (ed) (1998) Principles of chemical and biological sensors. Chemical Analysis: A Series of Monographs on Analytical Chemistry and Its Applications. Wiley-Interscience, New York
79. Dirks JL (1996) Diagnostic blood analysis using point-of-care technology. AACN Clin Issues 7:249
80. Dixon M (1953) The determination of enzyme inhibitor constants. Biochem J 55:170
81. Dixon M, Webb EC, Thorne CJR, Tipton KF (1979) Enzymes, 3rd edn. Longman, London
82. Dohnal M (1992) Qualitative partial differential equations and their realistic applications. Comput Ind 20:209
83. Dormieux L, Lemarchand E (2001) Homogenization approach of advection and diffusion in cracked porous material. J Eng Mech ASCE 127:1267
84. Eggenstein C, Borchardt M, Diekmann C et al (1999) A disposable biosensor for urea determination in blood based on an ammonium-sensitive transducer. Biosens Bioelectron 14:33

85. Eggins BR (2002) Chemical sensors and biosensors. Analytical techniques in the sciences. Wiley, Chichester
86. Ehrfeld W, Hessel V, Lwe H (2000) Microreactors: new technology for modern chemistry. Wiley-VCH, New York
87. Ferreira LS, SouzaMBD, Trierweiler JO et al (2003) Aspects concerning the use of biosensors for process control: experimental and simulation investigations. Comp Chem Eng 27:1165
88. Forrow NJ, Sanghera GS, Walters SJ (2002) The influence of structure in the reaction of electrochemically generated ferrocenium derivatives with reduced glucose oxidase. J Chem Soc, Dalton Trans, 3187
89. Forrow NJ, Bayliff SW (2005) A commercial whole blood glucose biosensor with a low sensitivity to hematocrit based on an impregnated porous carbon electrode. Biosens Bioelectron 21:3581
90. Fraser DM (ed) (1997) Biosensors in the body: continuous in vivo monitoring. Wiley, Chichester
91. Frew JE, Hill HO (1987) Electrochemical biosensors. Anal Chem 59:933A
92. Fuhrmann B, Spohn U (1998) An enzymatic amplification flow injection analysis (FIA) system for the sensitive determination of phenol. Biosens Bioelectron 13:895
93. Gaidamauskaite E, Baronas R Modeling a peroxide-based fluorescent biosensor. In: Louca LS, Chrysanthou Y, Oplatkova Z, Al-Begain K (eds) Proceedings, 22nd European Conference on modeling and Simulation ECMS 2008, 3–6 June 2008, Nicosia, Cyprus. EMCS 2008, Nicosia 2008
94. Gajovic N, Warsinke A, Huang T et al (1999) Characterization and mathematical modeling of a bienzyme electrode for L-malate with cofactor recycling. Anal Chem 71:4657
95. Garboczi EJ (1990) Permeability, diffusivity and microstructural parameters: a critical review. Cem Concr Res 20:591
96. Gorton L (1995) Carbon paste electrodes modified with enzymes, tissues, and cells. Electroanal 7:23
97. Gueshi T, Tokuda K, Matsuda H (1978) Voltammetry at partially covered electrodes. Part I. Chronopotentiometry and chronoamperometry at model electrodes. J Electroanal Chem 89:247
98. Gufreund H (1995) Kinetics for the life sciences. Cambridge University Press, Cambridge
99. Guilbault GG (1970) Enzymatic methods of analysis. Pergamon, Oxford
100. Guilbault GG (1980) Analytical uses of immobilized enzymes. Marcel Dekker, New York
101. Hall DL, McMullen SAH (2004) Mathematical techniques in multisensor data fusion. Artech House Information Warfare Library, 2nd edn. Artech House Inc, Norwood
102. Hameka HF, Rechnitz GA (1983) Theory of the biocatalytic membrane electrode. J Phys Chem 87:1235

103. Hameka HF, Rechnitz GA (1981) Steady-state theory of biocatalytic membrane electrodes. Anal. Chem. 53:1586
104. Ha J, Engler CR, Lee SJ (2008) Determination of diffusion coefficients and diffusion characteristics for chlorferon and diethylthiophosphate in Ca-Alginate gel beads. Biotechnol Bioeng 100:698
105. Hale PD, Lan HL, Boguslavsky LI et al (1991) Amperometric glucose sensors based on ferrocene-modified poly(ethylene oxide) and glucose oxidase. Anal Chim Acta 251:121
106. Harsanyi G (2000) Sensors in biomedical applications: fundamentals, technology and applications. CRC Press, New York
107. Hart JP, Crew A, Crouch E et al (2004) Some recent designs and developments of screen-printed carbon electrochemical sensors/biosensors for biomedical, environmental, and industrial analyses. Anal Lett 37:789
108. Hassan MM, Atiqullah M, Beg SA, Chowdhury MHM (1995) Analysis of non-isothermal tubular reactor packed with immobilized enzyme systems. Chem Eng J Biochem Eng J 58:275
109. Henri V (1902) Théorie générale de l'action de quelques diastases. Compt Rend Hebd Acad Sci Paris 135:916
110. Higham NJ (2002) Accuracy and stability of numerical algorithms, 2nd edn. SIAM, Philadelphia
111. Hobbs DW (1999) Aggregate influence on chloride ion diffusion into concrete. Cem Concr Res 29:1995
112. Ikeda T (1995) Enzyme-modified electrodes with bioelectrocatalytic function. Bunsuki Kagaku 44:333
113. Iliev I, Atanasov P, Gamburzev S et al (1992) Transient response of electrochemical biosensors with asymmetrical sandwich membranes. Sensor Actuat B-Chem 8:65
114. Ivanauskas F, Kaunietis I, Laurinavicius V et al (2005) Computer simulation of the steady state currents at enzyme doped carbon paste electrode. J Math Chem 38:355
115. Ivanauskas F, Baronas R, Kulys J (2005) Mathematical modeling of biosensors with perforated and selective membranes. Rakenteiden Mekaniikka - J Struct Mech 38:63
116. Ivanauskas F, Baronas R (2008) Modeling an amperometric biosensor acting in a flowing liquid. Int J Numer Meth Fluids 56:1313
117. Ivanauskas F, Baronas R (2008) Numerical simulation of a plate-gap biosensor with an outer porous membrane. Simul Model Pract Th 16:962
118. Ivanauskas F, Kaunietis I, Laurinavicius V et al (2008) Apparent Michaelis constant of the enzyme modified porous electrode. J Math Chem 43:1516
119. Jobst G, Moser I, Urban G (1996) Numerical simulation of multi-layered enzymatic sensors. Biosens Bioelectron 11:111
120. Jochum P, Kowalski BR (1982) A coupled two-compartment model for immobilized enzyme electrodes. Anal Chim Acta 144:25

121. Kalnin JR, Kotomin EA, Maier J (2002) Calculations of the effective diffusion coefficient for inhomogeneous media. J Phys Chem Solids 63:449
122. Kernevez JP (1980) Enzyme mathematics. Studies in mathematics and its applications. Elsevier, Amsterdam
123. Knopf GK, Bassi AS (2007) Smart biosensor technology. CRC Press, New York
124. Kohen A, Klinman JP (1999) Hydrogen tunneling in biology. Chem Biol 6(7):191
125. Kulys J, Kadziauskiene K (1978) Bioelectrocatalysis. Lactate-oxidizing electrode. Doklady Akademii Nauk SSSR 239:636
126. Kulys J, Samalius AS, Svirmickas G-JS (1980) Electron exchange between the enzyme active center and organic metal. FEBS Lett 114:7
127. Kulys J, Kadziauskiene K (1980) Yeast BOD sensor. Biotechnol Bioeng 22:221
128. Kulys JJ (1981) Analytical systems based on immobilized enzymes. Mokslas, Vilnius (in Russian)
129. Kulys J (1981) The development of new analytical systems based on biocatalysts. Anal Lett 14(B6):377
130. Kulys JJ (1981) Development of new analytical systems based on biocatalysers. Enzyme Microb Technol 3:344
131. Kulys J, Razumas V (1983) Biocatalysis in electrochemistry of organic compounds. Mokslas, Vilnius (in Russian)
132. Kulys JJ, Cenas NK (1983) Oxidation of glucose oxidase from penicillium vitale by one- and two-electron acceptors. Biochim Biophys Acta 744:57
133. Kulys JJ, Sorochinskii VV, Vidziunaite RA (1986) Transient response of bienzyme electrodes. Biosensors 2:135
134. Kulys J, Razumas V (1986) Bioamperometry. Mokslas, Vilnius (in Lithuanian)
135. Kulys J, Schmid RD (1990) A sensitive enzyme electrode for phenol monitoring. Anal Lett 23:589
136. Kulys JJ, Vidziunaite RA (1990) Amperometric enzyme electrodes with chemically amplified response. In: Wise DL (ed) Bioinstrumentation. Butterworths, Boston, pp 1263–1283
137. Kulys J, Schmid RD (1991) Bienzyme sensors based on chemically modified electrodes. Biosens Bioelectron 6:43
138. Kulys J (1991) Biosensors based on modified electrodes. In: Turner APF (ed) Advances in biosensors, vol 1. JAI Press, London Greenwich Connecticut, pp 107–124
139. Kulys J, Hansen HE, Buch-Rasmussen T et al (1994) Glucose biosensor based on the incorporation of Meldola blue and glucose oxidase within carbon paste. Anal Chim Acta 288:193
140. Kulys J, Hansen HE (1994) Carbon-paste biosensors array for long-term glucose measurement. Biosen Bioelectr 9:491

141. Kulys J, Hansen HE (1995) Long-term response of an integrated carbon paste based glucose biosensor. Anal Chim Acta 303:285
142. Kulys J (1999) The carbon paste electrode encrusted with a microreactor as glucose biosensor. Biosens Bioelectron 14:473
143. Kulys J, Krikstopaitis K, Ziemys A (2000) Kinetics and thermodynamics of peroxidase- and laccase-catalyzed oxidation of N-substituted phenothiazines and phenoxazines. J Biol Inorg Chem 5:333
144. Kulys J, Vidziunaite R (2003) Amperometric biosensors based on recombinant laccases for phenols determination. Biosens Bioelectron 18:319
145. Kulys J (2004) Modeling trienzyme biosensor at internal diffusion limitation. Anal Model Contr 9:139
146. Kulys J, Tetianec L (2005) Synergistic substrates determination with biosensors. Biosens Bioelectron 21:152
147. Kulys J (2005) Kinetics of biocatalytical synergistic reactions. Nonlinear Anal Model Contr 10:223
148. Kulys F, Baronas R (2006) Modeling of amperometric biosensors in the case of substrate inhibition. Sensors 6:1513
149. Kulys J, Tetianec L (2006) Modeling of amperometric biosensors in the case of substrate inhibition. Sensor Actuat B-Chem 113:755
150. Kwan RCH, Hon PYT, Mak WC et al (2006) Biosensor for rapid determination of 3-hydroxybutyrate using bienzyme system. Biosens Bioelectron 21:1101
151. Lammertyn J, Verboven P, Veraverbeke EA et al (2006) Analysis of fluid flow and reaction kinetics in a flow injection analysis biosensor. Sensor Actuat B-Chem 114:728
152. Laurinavicius VA, Kulys JJ, Gureviciene VV, Simonavicius KJ (1989) Flow through and cateter biosensors with an extended concentration range. Biomed Biochem Acta 48:905
153. Laurinavicius V, Razumiene J, Kurtinaitiene B et al (2002) Bioelectrochemical application of some PQQ-dependent enzymes. Bioelectrochem 55:29
154. Laurinavicius V, Razumiene J, Ramanavicius A, Ryabov AD (2004) Wiring of PQQdehydrogenases. Biosens Bioelectron 20:1217
155. Lawrence NS, Deo RP, Wang J (2004) Biocatalytic carbon paste sensors based on a mediator pasting liquid. Anal Chem 77:3735
156. Leatherbarrow RJ, Edwards PR (1999) Analysis of molecular recognition using optical biosensors. Curr Opin Chem Biol 3:544
157. Lemke K (1988) Mathematical simulation of an amperometric enzyme-substrate electrode with a pO2 basic sensor. Part 2. Mathematical simulation of the glucose oxidase glucose electrode. Med Biol Eng Comput 26:533
158. Levich VG (1962) Physicochemical hydrodynamics. Prentice-Hall, London
159. Liang JF, Li YT, Yang VC (2000) Biomedical application of immobilized enzymes. J Pharm Sci 89:979

160. Lide DR (ed) (2007-2008) Handbook of chemistry and physics, 88th edn. CRC Press, Boca Raton
161. Ligler FS, Taitt CR (2002) Optical biosensors: present and future Elsevier, Amsterdam
162. Lim T-C (2006) Application of binomial coefficients in representing central difference solution to a class of PDE arising in chemistry. J Math Chem 39:177
163. Llinas JR, Ruiz JM (1986) Multivariate analysis of chemical data sets with factor methods. In: Vemin G, Chanon M (eds) Computer aids to chemistry. Wiley, New York
164. Lyons MEG, Greer JC, Fitzgerald CA et al (1996) Reaction/diffusion withMichaelis-Menten kinetics in electroactive polymer films. Part 1. The steady- state amperometric response. Analyst 121:715
165. Lyons MEG, Bannon T, Hinds G, Rebouillat S (1998) Reaction/diffusion with Michaelis-Menten kinetics in electroactive polymer films. Part 2. The transient amperometric response. Analyst 123:1947
166. Lyons MEG, Murphy J, Rebouillat S (2000) Theoretical analysis of time dependent diffusion, reaction and electromigration in membranes. J Solid State Electrochem 4:458
167. Lyons MEG (2001) Mediated electron transfer at redox active monolayers. Sensors 1:215
168. Lyons ME (2006) Modeling the transport and kinetics of electroenzymes at the electrode/solution interface. Sensors 6:1765
169. Lobanov AV, Borisov IA, Gordon SH et al (2001) Analysis of ethanol-glucose mixtures by two microbial sensors: application of chemometrics and artificial neural networks for data processing. Biosens Bioelectron 16:1001
170. Luckarift HR (2008) Silica-immobilized enzyme reactors. J Liq Chromatogr R T 31:1568
171. Mackey D, Killard AJ, Ambrosi A, Smyth MR (2007) Optimizing the ratio of horseradish peroxidase and glucose oxidase on a bienzyme electrode: Comparison of a theoretical and experimental approach. Sensor Actuat B-Chem 122:395
172. Magner E (1998) Trends in electrochemical biosensors. Analyst 123:1967
173. Malinauskas A, Kulys J (1978) Alcohol, lactate and glutamate sensors based on oxidoreductases with regeneration of nicotinamide adenine dinucleotide. Anal Chim Acta 98:31
174. Malkavaara P, Aln R, Kolehmainen E (2000) Chemometrics: an important tool for the modern chemist, an example from wood-processing chemistry. J Chem Inf Comput Sci 40:438
175. Manz A, Graber N,Widmer HM (1990) Miniaturized total chemical analysis systems: a novel concept for chemical sensing. Sensor Actuat B-Chem 1:244
176. Mak KKW, Wollenberger U, Scheller F, Renneberg R (2003) An amperometric bi-enzyme sensor for determination of format using cofactor regeneration. Biosens Bioelectron 18:1095

177. Martens H, Ns T (1989) Multivariate calibration. Wiley, Chichester
178. Marti S, Roca M, Andres J et al (2004) Theoretical insights in enzyme catalysis. Chem Soc Rev 33:98
179. Matuszewski W, Trojanowicz M (1988) Graphite paste-based enzymatic glucose electrodefor flow-injection analysis. Analyst 113:735
180. Mell LD, Maloy T (1975) A model for the amperometric enzyme electrode obtained through digital simulation and applied to the immobilized glucose oxidase system. Anal Chem 47:299
181. Mell LD, Maloy T (1976) Amperometric response enhancement of the immobilized glucose oxidase enzyme electrode. Anal Chem 48:1597
182. Mello LD, Kubota LT (2002) Review of the use of biosensors as analytical tools in the food and drink industries. Food Chem 77:237
183. Merino S, Grinfeld M, McKee S (1998) A degenerate reaction diffusion system modeling an optical biosensor. Z Angew Math Phys 49:46
184. Meyerhoff ME, Duan CM, Meusel M (1995) Novel nonseparation sandwich-type electrochemical enzyme immunoassay system for detecting marker proteins in undiluted blood. Clin Chem 41:1378
185. Michaelis L, Menten ML (1913) Die Kinetik der Invertinwirkung. Biochem Z 49:333
186. Miscoria SA, Barrera GD, Rivas GA (2005) Enzymatic biosensor based on carbon paste electrodes modified with gold nanoparticles and polyphenol oxidase. Electroanal 17:1578
187. Mitchell A, Griffits D (1980) The finite difference methods in partial differential equations. Wiley, New York
188. Mizutani F, Yamanaka T, Tanabe Y, Tsuda K (1985) An enzyme electrode for L-lactate with a chemically amplified response. Anal Chim Acta 177:153
189. Mizutani F, Yabuki S, Okuda A, Katsura T (1991) Glucose-sensing electrode based on carbon paste containing ferrocene and polyethylene glycol-modified enzyme. Bull Chem Soc Jpn 64:2849
190. Mizutani F (1999) Application of enzyme-modified electrodes to biosensors. Bunseki Kagaku 48:809
191. Moreira JE, Midkiff SP, Gupta M et al (2000) Java programming for high performance numerical computing. IBM Systems J 39:21
192. Morton KW (1995) Numerical solution of convection-diffusion problems. Chapman/CRC, London
193. Mulchandani A, Rogers K (eds) (1998) Enzyme & microbial biosensors: techniques and protocols. Methods in biotechnology. Humana Press, Totowa, New Jersey
194. MullenWH, Keedy FH, Churchouse SJ, Vadgama PM (1986) Glucose enzyme electrode with extended linearity: application to undiluted blood measurements. Anal Chim Acta 183:59
195. Murray RW (1980) Chemically modified electrodes. Accts Chem Res 13:135
196. Nakamura H, Karube I (2003) Current research activity in biosensors. Anal Bioanal Chem 377:446

197. Nakamoto T, Hiramatsu H (2002) Study of odor recorder for dynamical change of odor using QCM sensors and neural network. Sens Actuators B-Chem 85:98
198. Naujikas R, Malinauskas A, Ivanauskas F (2007) Modeling of electrocatalytic processes at conducting polymer modified electrodes. J Math Chem 42:1069
199. Nernst W (1904) Theorie der Reaktionsgeschwindigkeit in heterogenen Systemen. Z Phys Chem 47:52
200. Nistor C, Rose A, Wollenberger U et al (2002) A glucose dehydrogenase biosensor as an additional signal amplification step in an enzyme-flow immunoassay. Analyst 127:1076
201. Özisik MN (1980) Heat conduction. Wiley, New York
202. Ojeda CB, Rojas FS (2006) Recent development in optical chemical sensors coupling with flow injection analysis. Sensors 6:1245
203. Pandey PC, Kayastha AM, Pandey V (1992) Amperometric enzyme sensor for glucose based on graphite paste-modified electrodes. Appl Bioch Biotech 33:139
204. Passaro VMN, Dell'olio F, Casamassima B, Leonardis FD (2007) Guided-wave optical biosensors. Sensors 7:508
205. Pfeiffer D, Scheller FW, Setz K, Schubert F (1993) Amperometric enzyme electrodes for lactate and glucose determinations in highly diluted and undiluted media. Anal Chim Acta 281:489
206. Pickup JC, Th´evenot DR (1993) European achievements in glucose sensor research. In: Turner APF (ed) Advances in Biosensors, Supplement 1. JAI Press, London, pp 201–225
207. Popovtzer R, Neufeld T, Ron EZ et al (2006) Electrochemical detection of biological reactions using a novel nano-bio-chip array. Sensor Actuat B-Chem 119:664
208. Popovtzer R, Natan A, Shacham-Diamand Y (2007) Mathematical model of whole cell based bio-chip: An electrochemical biosensor for water toxicity detection. J Electroanal Chem 602:17
209. Press WH, Flannery BP, Teukolsky SA, Vetterling WT (1993) Numerical Recipes in C: The Art of *Scientific Computing* Cambridge University Press, Cambridge
210. Rahamathunissa G, Rajendran L (2008) Application of He's variational iteration method in nonlinear boundary value problems in enzyme-substrate reaction diffusion processes: part 1. The steady-state amperometric response. J Math Chem 44:849
211. Razumas VJ, Kulys JJ, Malinauskas AA (1980) Kinetic amperometric determination of hydrolase activity. Anal Chim Acta 117:387
212. Reder S, Dieterle F, Jansen H et al (2003) Multi-analyte assay for triazines using cross-reactive antibodies and neural networks. Biosens Bioelectron 19:447

213. Renedo OD, Alonso-Lomillo MA, Martinez MJA (2007) Recent developments in the field of screen-printed electrodes and their related applications. Talanta 73:202
214. Reyes DR, Iossifidis D, Auroux PA, Manz A (2002) Micro total analysis systems. 1. Introduction, theory, and technology. Anal Chem 74:2623
215. Rickus JL (2005) Impact of coenzyme regeneration on the performance of an enzyme based optical biosensor: a computational study. Biosens Bioelectron 21:965
216. Richtmayer R, Morton K (1957) Difference methods for initial-value problems. An introduction. Interscience, New York
217. Rodriguez-Mozaz S, Marco MP, de Alda MJL, Barcelo D (2004) Biosensors for environmental applications: Future development trends. Pure Appl Chem 76:723
218. Rogers KR (1995) Biosensors for environmental applications. Biosens Bioelectron 10:533
219. Rong ZM, Cheema U, Vadgama P (2006) Needle enzyme electrode based glucose diffusive transport measurement in a collagen gel and validation of a simulation model. Analyst 131:816
220. Ruzicka J, Hansen EH (1988) Flow injection analysis. Wiley, New York
221. Sakura S, Buck RP (1992) Amperometric processes with glucose oxidase embedded in the electrode. Bioelect Bioenerg 28:387
222. Samarskii AA (2001) The theory of difference schemes. Marcel Dekker, New York-Basel
223. Sanz V, de Marcos S, Galb´an J (2007) Direct glucose determination in blood using a reagentless optical biosensor. Biosens Bioelectron 22:2876
224. Sapelnikova S, Dock E, Solna R et al (2003) Screen-printed multienzyme arrays for use in amperometric batch and flow systems. Anal Bioanal Chem 376:1098
225. Schachl K, Turkušić E, Komersová A et al (2002) Amperometric determination of glucose with a carbon paste biosensor. Collect Czech Chem Commun 67:302
226. Scheller FW, Pfeiffer D (1978) Enzyme electrodes. Z Chem 18:50
227. Scheller F, Renneberg R, Schubert F (1988) Coupled enzyme reactions in enzyme electrodes using sequence, amplification, competition, and antiinterference principles. In: Mosbach K (ed) Methods in enzymology, vol 137 Academic, New-York pp 29–43
228. Scheller F, Schubert F, Pfeiffer D et al (1989) Research and development of biosensors. A review. Analyst 114:653
229. Scheller F, Schubert F (1992) Biosensors. Elsevier, Amsterdam
230. Schöning MJ (2005) "Playing around" with field-effect sensors on the basis of EIS structures, LAPS and ISFETs. Sensors 5:126
231. Schubert F, Kirstein D, Schr¨oder KL, Scheller F (1985) Enzyme electrodes with substrate and co-enzyme amplification. Anal Chim Acta 169:391

232. Schulmeister T, Scheller F (1985) Mathematical treatment of concentration profiles and anodic current for amperometric enzyme electrodes. Anal Chim Acta 170:279
233. Schulmeister T, Scheller F (1985) Mathematical description of concentration profiles and anodic currents for amperometric two-enzyme electrodes. Anal Chim Acta 171:111
234. Schulmeister T (1987) Mathematical treatment of concentration profiles and anodic current of amperometric enzyme electrodes with chemically amplified response. Anal Chim Acta 201:305
235. Schulmeister T (1990) Mathematical modeling of the dynamic behavior of amperometric enzyme electrodes. Selective Electrode Rev 12:203
236. Schulmeister T, Pfeiffer D (1993) Mathematical modelling of amperometric enzyme electrodes with perforated membranes. Biosens Bioelectron 8:75
237. Schulmeister T, Rose J, Scheller F (1997) Mathematical modelling of exponential amplification in membrane-based enzyme sensors. Biosens Bioelectron 12:1021
238. Senda M, Ikeda T, Miki K, Hiasa H (1886) Amperometric biosensors based on a biocatalyst electrode with entrapped mediator. Anal Sci 2:501
239. Smith JM, Szathmary E (1996) On the likelihood of habitable worlds. Nature 384:107
240. Somasundrum M, Aoki K (2002) The steady-state current at microcylinder electrodes modified by enzymes immobilized in conducting or non-conducting material. J Electroanal Chem 530:40
241. Song M-J, Yun D-H, Jin J-H et al (2006) Steady state kinetics of cyclic conversions of substrate in amperometric bienzyme sensors. Jpn J Appl Phys 45:7197
242. Sorochinskii VV, Kurganov BI (1996) Amperometric biosensors with a laminated distribution of enzymes in their coating. Steady state kinetics. Biosens Bioelectron 11:45
243. Sorochinskii VV, Kurganov BI (1996) Steady state kinetics of cyclic conversions of substrate in amperometric bienzyme sensors. Biosens Bioelectron 11:225
244. Sorochinskii VV, Kurganov BI (1996) Diffusion-kinetic theory of stationary behaviour of amperometric bienzyme electrodes. Biosens Bioelectron 11:709
245. Sorochinskii VV, Kurganov BI (1997) Theoretical principles of the application of potentiometric enzyme electrodes. Appl Biochem Micro 33:116
246. Spichiger-Keller UE (1998) Chemical sensors and biosensors for medical and biological applications. Wiley-VCH, New York
247. Stamatin I, Berlic C, Vaseashta A (2006) On the computer-aided modeling of analyte-receptor interactions for an efficient sensor design. Thin Solid Films 495:312
248. Stefan R-I, Bokretsion RG, van Staden JF, Aboul-Enein HY (2003) Simultaneous determination of creatine and creatinine using amperometric biosensors. Talanta 60:1223

249. Stefano LD, Arcari P, Lamberti A et al (2007) DNA optical detection based on porous silicon technology: from biosensors to biochips. Sensors 7:214
250. Streffer K, Kaatz H, Bauer CG et al (1998) Application of a sensitive catechol detector for determination of tyrosinase inhibitors. Anal Chim Acta 362:81
251. Suzuki H (2000) Advances in the microfabrication of electrochemical sensors and systems. Electroanal 12:703
252. Suzuki H, Arakawa H, Karube I (2001) Fabrication of a sensing module using micromachined biosensors. Biosens Bioelectron 16:725
253. Svancara I, Vytras K, Barek J, Zima J (2001) Carbon paste electrodes in modern electroanalysis. Crit Rev Anal Chem 31:311
254. Takoh K, Ishibashi T, Matsue T, Nishizawa M (2005) Localized chemical stimulation of cellular micropatterns using a porous membrane-based culture substrate. Sensor Actuat B-Chem 108:683
255. Tang LX, Koochaki ZB, Vadgama PM (1990) Composite liquid membrane for enzyme electrode construction. Anal Chim Acta 232:357
256. Treloar PH, Christie IM, Vadgama PM (1995) Engineering the right membranes for electrodes at the biological interface; solvent cast and electropolymerised. Biosens Bioelectron 10:195
257. Tudorache M, Bala C (2007) Biosensors based on screen-printing technology, and their applications in environmental and food analysis. Anal Bioanal Chem 388:565
258. Turner APF, Karube I, Wilson GS (1987) Biosensors: fundamentals and applications. Oxford University Press, Oxford
259. Urban PL, Goodall DM, Bruce NC (2001) Biosensor microsystems. Sens Update 8:189
260. Urban PL, Goodall DM, Bruce NC (2006) Enzymatic microreactors in chemical analysis and kinetic studies. Biotechnol Adv 24:42
261. Updike SJ, Hicks GP (1967) The enzyme electrode. Nature 214:986
262. Vermeir S, Nicolai BM, Verboven P et al (2007) Microplate differential calorimetric biosensor for ascorbic acid analysis in food and pharmaceuticals. Anal Chem 79:6119
263. Vo-Dinh T (2003) Biomedical photonics handbook. CRC Press, New York
264. Vojinovic V, Esteves FMF, Cabral JMS, Fonseca LP (2006) Bienzymatic analytical microreactors for glucose, lactate, ethanol, galactose and l-amino acid monitoring in cell culture media. Anal Chim Acta 565:240
265. Wanekaya AK, Chen W, Mulchandani A (2008) Recent biosensing developments in environmental security. J Environ Monitor 10:703
266. Wang J, Liu J, Cepra G (1997) Thermal stabilization of enzymes immobilized within carbon paste electrodes. Anal Chem 69:3124
267. Wang J (2000) Analytical electrochemistry, 2nd edn. Wiley, New-York
268. Wang J (2001) Glucose biosensors: 40 years of advances and challenges. Electroanal 13:983

269. Wang YM, Pao CV (2006) Time-delayed finite difference reaction-diffusion systems with nonquasimonotone functions. Numerishe Mathematik 103:485
270. Weibel MK, Bright HJ (1971) The glucose oxidase mechanism. J Biol Chem 246:2734
271. Whitaker S (1999) The method of volume averaging. Kluwer, Boston
272. Wightman RM,Wipf DO (1989) Voltammetry at ultramicroelectrodes. In: Bard AJ (ed) Electroanalytical chemistry, vol 15. Marcel Dekker, New York, pp 267–353
273. Wilson R, Turner APF (1992) Glucose oxidase: an ideal enzyme. Biosens Bioelectron 7:165
274. Wollenberger U, Schubert F, Pfeiffer D, Scheller FW (1993) Enhancing biosensor performance using multienzyme systems. Trends Biotechnol 11:255
275. Wollenberger U, Lisdat F, Scheller FW (1997) Frontiers in biosensorics 2. Practical applications. Birkhauser Verlag, Basel
276. Wu X, Detzel CJ, Van Wie BJ, Haarsma SJ, Kidwel DA (2004) Model-based optimization of a conductive matrix enzyme electrode. Biotechnol Bioeng 88:135
277. Wu BL, Zhang GM, Zhang Y, Shuang SM, Choi MMF (2005) Measurement of glucose concentrations in human plasma using a glucose biosensor. Anal Biochem 340:181
278. Wu B, Wang Y, Li J, Song Z, Huang J et al (2006) An optical biosensor for kinetic analysis of soluble interleukin-1 receptor I binding to immobilized interleukin-1α. Talanta 70:485
279. Zhang Q, Xu JJ, Chen HY (2006) Glucose microfluidic biosensors based on immobilizing glucose oxidase in poly(dimethylsiloxane) electrophoretic microchips. J Chromatogr A 1135:122
280. Zhao W, Xu JJ, Chen HY (2006) Electrochemical biosensors based on layer-by-layer assemblies. Electroanal 18:1737
281. Zhu ZQ, Zhang J, Zhu JZ (2005) An overview of Si-based biosensors. Sensor Lett 3:71
282. Zupan J, Gasteiger J (1999) Neural networks in chemistry and drug design, 2nd edn. Wiley- VCH, Weinheim
283. Xi Y, Bazant ZP (1999) Modeling chloride penetration in saturated concrete. J Mater Civil Eng 11:58
284. Yang HM (2000) Mathematical model for liquid-liquid phase-transfer catalysis. Chem Eng Comm 179:117
285. Yang XS (2004) Pattern formation in enzyme inhibition and cooperativity with parallel cellular automata. Parallel Comput 30:741
286. Ylilammi M, Lehtinen L (1988) Numerical analysis of a theoretical one-dimensional amperometric enzyme sensor. Med Biol Eng Comput 26:81
287. Yokoyama K, Koide S, Kayanuma Y (2002) Cyclic voltammetric simulation of electrochemically mediated enzyme reaction and elucidation of biosensor behaviors. Anal Bioanal Chem 372:248

ثبت المصطلحات

أولاً: عربي – إنجليزي

أ

إثارة ضوئية	excitation light
أحادي الإنزيم	mono-enzyme
إحداثيات كارتيزية	Cartesian coordinates
اختبار نقطة العناية	point-of-care testing
اختزال سداسي سيانيد (III) المحفز بإنزيم أوكسيداز	oxidases-catalyzed hexacyanoferrate(III) reduction
إخماد الإنزيم	inactivation of enzyme
أدينوسين ثلاثي الفوسفات	adenosine triphosphate
أدينوسين ثلاثي الفوسفات	ATP
استجابة الحساس الحيوي	biosensor response

استجابة الحساس الحيوي القصوى	maximal biosensor response
الاستجابة الكلية للحساس الحيوي	overall biosensor response
استجابة حالة الاستقرار	steady state response
استجابة حساس حيوي بقياس الجهد	potentiometric biosensor response
استجابة حساس حيوي مستقر (ساكن)	stationary biosensor response
استجابة متعددة	multi-response
استقرار الاستجابة	response stability
استقرار الإلكترود	electrode stability
استقرار الإنزيم	enzyme stability
استقرارية	Stability
إشارة إلكترونية	electronic signal
إشارة مكتسبة	signal gain
اضمحلال أسي	exponential decay
إطالة زمن الاستجابة	response time prolongation
إعادة أكسدة الوسيط	mediator reoxidation
إعادة توليد الناتج	product regeneration

أكسدة الجلوكوز	glucose oxidation
أكسدة بيتا- د- جلوكوز	Beta-D-glucose oxidation
أكسدة-اختزال	Redox
إلكترود أوكسجين	oxygen electrode
إلكترود انتقائي الأيون	ion-selective electrode
إلكترود بقياس الأمبير	amperometric electrode
إلكترود ثنائي الإنزيم	bienzyme electrode
إلكترود جلوكوزي	glucose electrode
إلكترود ذو قرص دوار	rotating disk electrode
إلكترود عجينة الكربون	carbon paste electrode
إلكترود عجينة الكربون المسامي	carbon paste porous electrode
إلكترود مسامي	porous electrode
إلكترود مصنوع من عجينة الكربون	CPE
إلكترود معدل كيميائياً	chemically modified electrode
إلكترودات عجينة الكربون	carbon past electrodes (CPEs)
إلكترود-نشط	electrode-active
ألياف ضوئيه	optical fibber

امتزاز	Adsorption
امتصاص	Absorbance
امتصاص ضوئي	light absorbance
الانتشارية الخارجية	external diffusivity
انتقائية الحساس الحيوي	biosensor selectivity
انتقائية المبدل	transducer selectivity
انحناء	Curvature
إنزبم جلوكوز أوكسيداز المختزل	reduced glucose oxidase (GOred)
إنزيم البروكسيداز	Peroxidase
إنزيم الكرياتينيز	Creatininase
إنزيم أوكسي ريداكتاز	Oxidoreductases
إنزيم أوكسيداز الجلوكوز	glucose oxidase (GO)
إنزيم بيروكسيداز	enzyme peroxidase
إنزيم بيروكسيداز الفطري	fungal peroxidase
إنزيم جلوكوز الأكسيداز المتأكسد	oxidized glucose oxidase
إنزيم د- جلوكوز أوكسيداز	D-glucose oxidase
إنزيم ديهيدروجينيز الكحول	alcohol dehydrogenase

إنزيم ديهيدروجينيز جلوكوز	glucose dehydrogenase
إنزيم ساركوسكين أوكسيداز	sarcosine oxidase
إنزيم مُثَّبت	immobilized enzyme
إنزيم هيكسوكينيز	hexokinase
إنزيمات تثبيت مشتركة	co-immobilized enzymes
إنزيمات ديهيدروجينيز	dehydrogenases
انفتاح الغشاء المثقب	perforated membrane openness

ب

بادئ	initiator
بارامتر حقيقي اختياري	arbitrary real parameter
بارامتر لابعدي	dimensionless parameter
بارامترات إنزيمية	enzymatic parameters
بارامترات مؤرضة أقل	undersell grounded parameters
بريجس وهالدين	Briggs and Haldane

ت

تألق (تفلور)	fluorescence
تألق الناتج	product fluorescence
تألق حالة الاستقرار	steady state fluorescence
تباعدي	divergent
تبعيه خطية	Linear dependence
تبعيه لوغاريتميه	logarithmic dependence
تتفاوت، تتنوع، تتغير	vary
تثبيط الإنزيم	enzyme inhibition
تثبيط الركيزة	substrate inhibition
تثبيط الناتج	product inhibition
تجمعات، تراكمات	aggregates
تحقق من صحة النموذج	model validation
تحقيق سمك الغشاء الأمثل	membrane thickness optimization
تحليل الحقن	injection analysis
تحليل الحقن التدفقي (السرياني)	flow injection analysis
تحليل الحقن المتسلسل	sequential injection analysis

تحليل الدفعه	batch analysis
تحليل متعدد المكونات	multi-component analysis
تحول الركيزة بالتوازي	parallel substrate conversion
تحويل الركائزالمتوالي	consecutive substrates conversion
تحويل الركيزة المتوالي	consecutive substrate conversion
تحويل الركيزة الحلقي	substrate cyclic conversion
تحويل المنتج الحلقي	cyclic product conversion
تحويل الوسيط الحلقي	cyclic mediators conversion
تحويل بين الحفاز المعاون والركيزة	synergistic substrates conversion
تحويل ركائز إنزيمي	enzymatic substrates conversion
تحويل كهروكيميائي	electrochemical conversion
تحويل كيميائي	chemical conversion
تحويل لابلاس	Laplace transformation
تخصصية عالية	high specificity
تدرج أعظمي	maximal gradient
تدرج أعظمي عديم البعد	dimensionless maximal gradient
تدفق	flow

تدفق صفري	zero flux
تذبذبات	oscillations
تراكب طورين	two-phase composite
تراكيز حرجة	critical concetrations
تراكيز لابعدية	dimensionless concentration
تركيز ابتدائي	initial concentration
تركيز الركيزة المشبعة	saturating substrate concentration
تركيز ثابت	stationary concentration
تركيز حالة الاستقرار	steady state concentration
تركيز متوسطي	averaged concentration
تساهمية	covalent
تشبع	Saturation
تشققيه، تصدعية	rimosity
تشييد اندماجي (اتحادي)	combinatorial synthesis
تضخيم، تكبير	amplification
تعبير أُسي	exponential expression
تعبير باتلر–فولمر	Butler–Volmer expression

تعرج	Tortuosity
تعرج وحدوي	unitary tortuosity
تعيير (جعله عياري)	normalization
تغير الفراغية، تفارغية	allostery
تفاعل الحفز الحيوي	biocatalytical reaction
تفاعل إنزيم هيكسوكينيز	hexokinase reaction
تفاعل إنزيمي	enzymatic reaction
تفاعل حفاز معاون	synergistic reaction
تفاعل دقيق متجانس	homogenized MR
تفاعل قادح	trigger reaction
تفاعل قادح الإنزيمي	enzymatic trigger reaction
تفاعل كهروكيميائي	electrochemical reaction
تفاعل من الرتبة الأولى	first-order reaction
تقريب حالة شبه الاستقرار	quasi steady state approximation
تقريب عددي	numerical approximation
تقنية الفرق المحدود	finite difference technique
تقنية حيوية	biotechnology

تكبير الاستجابة	response amplification
تكبير إنزيمي	enzymatic amplification
تكبير كهروكيميائي	electrochemical amplification
تكبير كيميائي	chemical amplification
تمييز كيميائي حيوي	biochemical recognition
تنوع	diversity
توزيع الاتزان	equilibrium distribution
توسط معامل الانتشار	averaging diffusion coefficient
تيار استقراري معياري	normalized steady state current
تيار الحساس الحيوي	biosensor current
تيار إلكترود الأوكسجين	oxygen electrode current
تيار أنودي	anodic current
تيار ثابت (مستقر)	stationary current
تيار جزئي ساكن	partial stationary current
تيار حالة الاستقرار	steady state current
تيار حساس حيوي في حالة الاستقرار	steady state biosensor current
تيار لابعدي	dimensionless current

تيار مستحث	faradaic current

ث

ثابت التشبع	saturation constant
ثابت الحفز	catalytic constant
ثابت تبادل الإلكترون ثنائي الجزيء	bimolecular electron exchange constant
ثابت تثبيط الركيزة	substrate inhibition constant
ثابت تثبيط الناتج	product inhibition constant
ثابت تفاعل الرتبة الأولى	first-order reaction constant
الثابت ثنائي الجزيء الظاهري	apparent bimolecular constant
ثابت فاراداي	Faraday constant
ثابت ميكايليس	Michaelis constant
ثقب الغشاء	membrane perforation
ثلاثية قطرية	tridiagonality
ثوابت ميكايليس – منتن	Michaelis–Menten constants

ج

جسيم (دقيقة) السيليكا	silica particle

جهاز قياس التحويل الأمبيرومتري	amperometric transducer
جهد الإلكترود	electrode potential
جهد الحساس الحيوي	biosensor potential

ح

حاصل الكم	quantum yield
حالة استقرار	steady state
حالة انتقالية	transition state
حالة شبه الاستقرار (مستقرة)	quasi steady state
حامل السيليكا (CPC)	CPC-silica carrier
حركية ميكايليس - منتن	Michaelis–Menten kinetics
حساس حيوي يتطلب أوكسجيناً كيميائياً حيوي	BOD biosensor
حساس الجلوكوز الحيوي	glucose biosensor
حساس الغشاء الحيوي	membrane biosensor
حساس حيوي	Biosensor
حساس حيوي أحادي الطبقة	mono-layer biosensor
حساس حيوي أيضي	metabolite biosensor

حساس حيوي بالتألق (تفلور)	fluorescence biosensor
حساس حيوي بإنزيم أحادي الطبقة	mono-layer enzyme biosensor
حساس حيوي بقياس الأمبير	amperometric biosensor
حساس حيوي بقياس الجهد	potentiometric biosensor
حساس حيوي ثلاثي الإنزيم	trienzyme biosensor
حساس حيوي ثلاثي الطبقات	three-layer biosensor
حساس حيوي ثنائي الإنزيم	two-enzyme biosensor
حساس حيوي ثنائي الإنزيم	bienzyme biosensor
حساس حيوي حساس للفينول	phenol sensitive biosensor
حساس حيوي ضوئي	optical biosensor
حساس حيوي ضوئي مستند على إنزيم البروكسيداز	peroxidase-based optical biosensor
حساس حيوي كرياتيني	creatinine biosensor
حساس حيوي متجانس	homogenized biosensor
حساس حيوي متعدد الطبقات تشبة السندوتش	sandwich-like multi-layer biosensor
حساس حيوي متعددة الإنزيم	multi-enzyme biosensor

حساس حيوي متعددة الطبقات	multi-layer biosensor
حساس حيوي محفز حيويا	biocatalytical biosensor
حساس حيوي مستند على الكائنات الدقيقة	biosensor based on microorganisms
حساس حيوي يتطلب أوكسجيناً كيميائياً حيوياً	biochemical oxygen demand biosensor
حساس فجوة اللوح الحيوي	plate-gap biosensor
حساس ميكروبي حيوي	microbial biosensor
حساسية الحساس الحيوي	biosensor sensitivity
حساسية لابعديه	dimensionless sensitivity
حساسية نسبية	relative sensitivity
حفاز بيولوجي	biological catalyst
حفاز حيوي	biocatalyst
حل تحليلي	analytical soltution
حل تحليلي لمعادلات تفاضلية جزئية	analytical solution of partial differential equations
حُليلة (المادة المراد تحليلها) تحت الفحص	analyte under determination

خ

خشونة السطح	surface roughness
خطأ عددي	numerical error
خلية ميكروبية	microbial cell

د

دالة المغايرة النسبية الموجبة	positive allometric function
دالة زائدية	hyperbolic function
دالة لاخطية (غير خطية)	nonlinear function
دالة ميكايليس – منتن	Michaelis–Menten function
د–جلوكوز أوكسيداز المثبت	immobilized D-glucose oxidase
دورة التجديد والاستهلاك	consumption–regeneration cycle

ر

راكد، آسن	Stagnant

ز

زمن الاستجابة	response time

زمن التيار الأقصى	time of maximal current
زمن النصف الظاهري	apparent half-time
زمن لابعدي	dimensionless time
زمن نصف حالة الاستقرار	half-time of steady state
زيت معدني	mineral oil

س

ساركوسين (مادة كميائية)	sarcosine
سداسي سيانو الحديدك	hexacyanoferrate
سعة	argument
سمات	peculiarity
سمك فعال	effective thickness
سمك لابعدي	dimensionless thickness
سيانيد الحديدوز	ferrocyanid
سيتوكروم	cytochrome b2

ش

شبكة عصبية اصطناعية	artificial neural network
شبكة متقطعة ثنائية الخطية	bilinear discrete grid
شرط حدي صفري التدفق	zero flux boundary condition
شرط حدي عدم التسرب	non-leakage boundary condition
شروط ابتدائية	initial conditions
شروط المطابقة	matching conditions
شروط ثابتة	stationary condition
شروط حالة الاستقرار	steady state conditions
شروط حدية	boundary conditions
شقائق كاتيونيه	cation radicals

ص

صفات تألقية	fluorophore
صيغة كاردانو	Cardano formula

ط

طاقة التفاعل الحرة	free energy of reaction

طبقة الانتشار	diffusion layer
طبقة الانتشار الخارجية	external diffusion layer
طبقة الانتشار الفعالة	effective diffusion layer
طبقة انتشار نرنست	Nernst diffusion layer
طبقة انتقائية	selective layer
طبقة إنزيم	enzyme layer
طبقة راكدة	stagnant layer
طبقة رقيقة	Thin layer
طريقة الحذف	elimination method
طريقة المغايرة النسبية	Allometric fashion
طريقة فورييه	Fourier method

ع

عدد بيوت	Biot number
عدد دامكولر	Damköhler number
عُقد الشبكة	grid nodes
علم الحياة الفلكي	astrobiology

عملية التجانس	homogenization process
عملية الحفز الحيوي	biocatalytical process
عمودي	perpendicular

غ

غشاء الإنزيم	enzyme membrane
غشاء الحفز الحيوي	biocatalytical membrane
غشاء انتقائي	selective membrane
غشاء إنزيم متعدد الطبقات	multi-layer enzyme membrane
غشاء خارجي	outer membrane
غشاء ديلزة (فصل بالانتشار الغشائي)	dialysis membrane
غشاء شبة منفذ	semipermeable membrane
غشاء مثقب	perforated membrane
غشاء مسامي	porous membrane
غشاء مسامي خامل	inert porous membrane
غطاء إلكترودي	electrode coverage
غير منفذ، كتيم	impermeable

ف

فسفرة الجلوكوز	glucose phosphorylation
فطر خميره أسمه Hansenula anomala	Hansenula anomala
فوق أكسيد الهيدروجين	hydrogen peroxide

ق

قالب من مادة CPC	CPC-matrix
قانون بير-لامبرت	Beer-Lambert Law
قدح	Triggering
قصوى	extreme
قياس الأمبير (أمبيرومتري)	amperometry
قيد الانتشار الخارجي	external diffusion limitation
قيد الانتشار الداخلي	internal diffusion limitation
قيمة قصوى	maximal value

ك

كار (اسم عالم)	Carr
كثافة التيار	current density

كثافة تيار الحساس الحيوي	biosensor current density
كثافة تيار حالة الاستقرار	steady state current density
كرياتنين	Creatinine
كرياتين (حمين)	creatine
كسر حجمي	volume fraction
كُلي	bulk
كيمياء رياضية	mathematical chemistry

ل

لاحركية ميكايليس – منتن	non Michaelis–Menten kinetics
لاكتات -L	L-lactate
لغة جافا	JAVA languag
لوح غير شفاف	nontransparent plate

م

مادة CPC	CPC
مادة خاملة كهربائياً	electro-inactive substance
مادة لاصقة عضوية	organic binder

مبدل	transducer
مبدل بقياس فرق الجهد	potentiometric transducer
مبدل ضوئي	optical transducer
متباينات	inequalities
مترافقة	conjugated
متراكب إنزيم – ركيزة	enzyme substrate complex (ES)
متسلسلة	series
متعدد الأسطح	multi-surface
متغير	variant
متوازي السطوح	parallelepiped
مجاور	neighborhoods
محافظ	conservative
محاكاة حاسوبية	computer simulation
محاكي عددي	numerical simulator
محاور لابعديه	dimensionless coordinate
محصلة نسبية للإشارة الناتجة	resultant relative output signal
مخطط الحفز الحيوي	biocatalytical scheme

مخطط حفاز معاون	synergistic scheme
مخطط فرقي محدود صريح	explicit finite difference scheme
مخطط فرقي محدود ضمني	implicit finite difference scheme
مخطط قادح	trigger scheme
مخطط كرة الطاولة المنظم	ordered ping-pong scheme
مخطط ميكايليس – منتن	Michaelis–Menten scheme
مرحلة	stadium
مركب	compound
مركب متأكسد	oxidized compound
مركبات غير متجانسة	heterocyclic compounds
مزيج من المركبات	mixture of compounds
مسار البروتون	proton tunneling
مسافة لابعدية	dimensionless distance
مسألة قيم حدية ابتدائية	initial boundary value problem
مسام نووية	nucleopore
مسامية	porosity
مساواة تقريبية	rough equality

مستقر، رتيب	monotonic
مصفوفه من المفاعلات الدقيقة	array of microreactors
مصفوفه من المفاعلات الدقيقة للإنزيم	array of enzyme microreactors
مطلي، مغلف	coated
معادلات النموذج	model equations
معادلات تفاضلية جزئية	partial differential equations (PDE)
معادلات تفاضلية عادية	ordinary differential equations (ODE)
معادلات حاكمة	governing equations
معادلة حاكمة	governing equation
معادلة كوتريل	Cottrell equation
معادلة نرنست	Nernst equation
معامل الامتصاص	extinction coefficient
معامل الامتصاص المولي	molar extinction coefficient
معامل الانتشار الفعال	effective diffusion coefficient
معامل انضباط نسب الذرات	stoichiometric coefficient
معامل تحميل إنزيمي	enzyme loading factor
معامل حركية الإنزيم الخطي	linear enzyme kinetic coefficient

معايرة الحساس الحيوي	biosensor calibration
معجون الكربون	carbon paste
معدل ابتدائي	initial rate
معدل الإنزيم الأقصى	maximal enzyme rate
معدل تدفق قوي	precious flow rate
معدل تفاعل الرتبة الأولى	first-order reaction rate
معدل تفاعل الرتبة صفر	zero-order reaction rate
معكوس السُمك	inverse thickness
معلومات زائدة	redundant information
مفاعل إنزيمي دقيق	enzyme microreactor
مفاعل دقيقة	microreactor (MR)
مقاومة الحساس الحيوي	biosensor resistance
مُكوَّن، عنصر	constituent
منحنيات معايرة	calibration curves
منحنيات، رسوم جانبية	profiles
منطقة الحمل الحراري	convective region
منطقة متعددة الاستقرار	multi-steady state zone

مواد	substances

ن

ناقل السيليكا	silica carrier
نتيجة جبرية لمعادلة فرقية	algebraic corollary difference equation
نرستاين	Nerstian
نشاط الحفز	catalytic activity
نشاط إنزيم	enzyme activity
نشاط إنزيم البروكسيداز	peroxidase activity
نشاط جزيئي	molecular activity
نظام حركي	kinetic regime
نظام ضوئي	optical system
نظام متعدد الإنزيمات	multienzyme system
نظام متعدد الإنزيمات	polyenzyme system
نظام متعدد الإنزيمات	adsorbed polyenzyme system
نفاذية	permeability
نقاط التقسيم (الانشطار)	splitting points

نقاط عُقدية	nodal points
نقاط مرتبطة أو مشتركة	points engaged
نمط قادح	trigger mode
نموذج أحادي الطبقة	one-layer model
نموذج ثلاثي الطبقات	three-layer model
نموذج ثلاثي الوحدات	three-compartment model
نموذج ثنائي الوحدات	two-compartment model
نموذج رباعي الوحدات	four-compartment model
نموذج رياضي	mathematical model
نموذج رياضي ثنائي الوحدات	two-compartment mathematical model
نموذج فجوة اللوح	plate-gap model
نموذج لابعدي	dimensionless model
نموذج متعدد الطبقات	multi-layer model
نهج (أسلوب) متعدد الطبقات	multi-layer approach
نهج حالة شبه الاستقرار	quasi-steady state approach
نهج نرنست	Nernst approach
نوع مسامي نووي مثقب	nucleopore type perforated

و

وحدات تألق (فلورية) نسبية	relative fluorescence units (RFU)
وحدة (موديول) الانتشار	diffusion module
وحدة انتشار مختزلة	reduced diffusion module
وسط تربية	breedingmedia
وسط دوري	periodic media
وسيط	mediator
وسيط شامل	total mediator

ي

يتقارب	converges
يناظر	corresponds

(إنجليزي- عربي)

A

Absorbance	امتصاص
adenosine triphosphate	أدينوسين ثلاثي الفوسفات
Adsorption	امتزاز
aggregates	تجمعات، تراكمات
alcohol dehydrogenase	إنزيم ديهيدروجينيز الكحول
allostery	تغير الفراغية، تفارغية
amperometric biosensor	حساس حيوي بقياس الأمبير
amperometric electrode	إلكترود بقياس الأمبير
amperometric transducer	جهاز قياس التحويل الأمبيرومتري
amperometry	قياس الأمبير (أمبيرومتري)
amplification	تضخيم، تكبير
analyte under determination	حُليلة (المادة المراد تحليلها) تحت الفحص
analytical soltution	حل تحليلي

analytical solution of partial differential equations	حل تحليلي لمعادلات تفاضلية جزئية
anodic current	تيار أنودي
apparent bimolecular constant	الثابت ثنائي الجزيء الظاهري
arbitrary real parameter	بارامتر حقيقي اختياري
ATP	أدينوسين ثلاثي الفوسفات
averaged concentration	تركيز متوسطي
averaging diffusion coefficient	توسط معامل الانتشار

B

Batch analysis	تحليل الدفعه
Beta-D-glucose oxidation	أكسدة بيتا- د- جلوكوز
bienzyme biosensor	حساس حيوي ثنائي الإنزيم
bienzyme electrode	إلكترود ثنائي الإنزيم
bimolecular electron exchange constant	ثابت تبادل الإلكترون ثنائي الجزيء
biocatalyst	حفاز حيوي
biocatalytical biosensor	حساس حيوي محفز حيوياً

عملية الحفز الحيوي	biocatalytical process
تفاعل الحفز الحيوي	biocatalytical reaction
حساس حيوي يتطلب أوكسجيناً كيميائياً حيوياً	biochemical oxygen demand biosensor
تمييز كيميائي حيوي	biochemical recognition
حفاز بيولوجي	biological catalyst
حساس حيوي	Biosensor
حساس حيوي مستند على الكائنات الدقيقة	biosensor based on microorganisms
تيار الحساس الحيوي	biosensor current
جهد الحساس الحيوي	biosensor potential
استجابة الحساس الحيوي	biosensor response
انتقائية الحساس الحيوي	biosensor selectivity
حساسية الحساس الحيوي	biosensor sensitivity
تقنية حيوية	biotechnology
حساس حيوي يتطلب أوكسجيناً كيميائياً حيوياً	BOD biosensor

بريجس وهالدين	Briggs and Haldane
تعبير باتلر–فولمر	Butler–Volmer expression

C

إلكترودات عجينة الكربون	carbon past electrodes (CPEs)
إلكترود عجينة الكربون	carbon paste electrode
إلكترود عجينة الكربون المسامي	carbon paste porous electrode
إحداثيات كارتيزية	Cartesian coordinates
ثابت الحفز	catalytic constant
تكبير كيميائي	chemical amplification
تحويل كيميائي	chemical conversion
إلكترود معدل كيميائياً	chemically modified electrode
إنزيمات تثبيت مشتركة	co-immobilized enzymes
تشييد اندماجي (اتحادي)	combinatorial synthesis
تحويل الركيزة المتوالي	consecutive substrate conversion
تحويل الركائز المتوالي	consecutive substrates conversion
دورة التجديد والاستهلاك	consumption–regeneration cycle
تساهمية	covalent

حامل السيليكا (CPC)	CPC-silica carrier
إلكترود مصنوع من عجينة الكربون	CPE
إنزيم الكرياتينيز	Creatininase
حساس حيوي كرياتيني	creatinine biosensor
تراكيز حرجة	critical concetrations
انحناء	Curvature
تحويل الوسيط الحلقي	cyclic mediators conversion
تحويل المنتج الحلقي	cyclic product conversion

D

إنزيمات ديهيدروجينيز	dehydrogenases
إنزيم د- جلوكوز أوكسيداز	D-glucose oxidase
تراكيز لابعدية	dimensionless concentration
تيار لابعدي	dimensionless current
تدرج أعظمي عديم البعد	dimensionless maximal gradient
بارامتر لابعدي	dimensionless parameter
حساسية لابعديه	dimensionless sensitivity
تباعدي	divergent

تنوع	diversity

E

تكبير كهروكيميائي	electrochemical amplification
تحويل كهروكيميائي	electrochemical conversion
تفاعل كهروكيميائي	electrochemical reaction
جهد الإلكترود	electrode potential
استقرار الإلكترود	electrode stability
إلكترود–نشط	electrode-active
إشارة إلكترونية	electronic signal
تكبير إنزيمي	enzymatic amplification
بارامترات إنزيمية	enzymatic parameters
تفاعل إنزيمي	enzymatic reaction
تحويل ركائز إنزيمي	enzymatic substrates conversion
تفاعل قادح الإنزيمي	enzymatic trigger reaction
تثبيط الإنزيم	enzyme inhibition
إنزيم بيروكسيداز	enzyme peroxidase
استقرار الإنزيم	enzyme stability

equilibrium distribution	توزيع الاتزان
excitation light	إثارة ضوئية
exponential decay	اضمحلال أسي
exponential expression	تعبير أُسي

F

faradaic current	تيار مستحث
Faraday constant	ثابت فاراداي
finite difference technique	تقنية الفرق المحدود
first-order reaction	تفاعل من الرتبة الأولى
first-order reaction constant	ثابت تفاعل الرتبة الأولى
flow	تدفق
flow injection analysis	تحليل الحقن التدفقي (السرياني)
fluorescence	تألق (تفلور)
fluorescence biosensor	حساس حيوي بالتألق (تفلور)
fungal peroxidase	إنزيم بيروكسيداز الفطري

G

glucose biosensor	حساس الجلوكوز الحيوي

إنزيم ديهيدروجينيز جلوكوز	glucose dehydrogenase
إلكترود جلوكوزي	glucose electrode
إنزيم أوكسيداز الجلوكوز	glucose oxidase (GO)
أكسدة الجلوكوز	glucose oxidation

H

إنزيم هيكسوكينيز	hexokinase
تفاعل إنزيم هيكسوكينيز	hexokinase reaction
تخصصية عالية	high specificity
حساس حيوي متجانس	homogenized biosensor
تفاعل دقيق متجانس	homogenized MR
دالة زائدية	hyperbolic function

I

د-جلوكوز أوكسيداز المثبت	immobilized D-glucose oxidase
إنزيم مُثَّبت	immobilized enzyme
إخماد الإنزيم	inactivation of enzyme
تركيز ابتدائي	initial concentration
بادئ	initiator

injection analysis	تحليل الحقن
ion-selective electrode	إلكترود انتقائي الأيون

L

Laplace transformation	تحويل لابلاس
light absorbance	امتصاص ضوئي
Linear dependence	تبعيه خطية
logarithmic dependence	تبعيه لوغاريتميه

M

matching conditions	شروط المطابقة
maximal biosensor response	استجابة الحساس الحيوي القصوى
maximal gradient	تدرج أعظمي
mediator reoxidation	إعادة أكسدة الوسيط
membrane biosensor	حساس الغشاء الحيوي
membrane perforation	ثقب الغشاء
membrane thickness optimization	تحقيق سمك الغشاء الأمثل
metabolite biosensor	حساس حيوي أيضي
Michaelis constant	ثابت ميكايليس

Michaelis–Menten constants	ثوابت ميكايليس – منتن
Michaelis–Menten function	دالة ميكايليس – منتن
Michaelis–Menten kinetics	حركية ميكايليس – منتن
microbial biosensor	حساس ميكروبي حيوي
microbial cell	خلية ميكروبية
model validation	التحقق من صحة النموذج
mono-enzyme	أحادي الإنزيم
mono-layer biosensor	حساس حيوي أحادي الطبقة
mono-layer enzyme biosensor	حساس حيوي بإنزيم أحادي الطبقة
multi-component analysis	تحليل متعدد المكونات
multi-enzyme biosensor	حساس حيوي متعدد الإنزيم
multi-layer biosensor	حساس حيوي متعدد الطبقات
multi-response	استجابة متعددة

N

nonlinear function	دالة لاخطية (غير خطية)
normalization	تعيير (جعله عياري)
normalized steady state current	تيار استقراري معياري

numerical approximation	تقريب عددي
numerical error	خطأ عددي

O

optical biosensor	حساس حيوي ضوئي
optical fibber	ألياف ضوئيه
oscillations	تذبذبات
overall biosensor response	الاستجابة الكلية للحساس الحيوي
oxidized glucose oxidase	إنزيم جلوكوز الأكسيداز المتأكسد
Oxidoreductases	إنزيم أوكسي ريداكتاز
oxygen electrode	إلكترود أوكسجيني
oxygen electrode current	تيار إلكترود الأوكسجين

P

parallel substrate conversion	تحول الركيزة بالتوازي
partial stationary current	تيار جزئي ساكن
perforated membrane openness	انفتاح الغشاء المثقب
Peroxidase	إنزيم البروكسيداز

حساس حيوي ضوئي مستند على إنزيم البروكسيداز	peroxidase-based optical biosensor
حساس حيوي حساس للفينول	phenol sensitive biosensor
حساس فجوة اللوح الحيوي	plate-gap biosensor
اختبار نقطة العناية	point-of-care testing
إلكترود مسامي	porous electrode
دالة المغايرة النسبية الموجبة	positive allometric function
حساس حيوي بقياس الجهد	potentiometric biosensor
استجابة حساس حيوي بقياس الجهد	potentiometric biosensor response
تألق الناتج	product fluorescence
تثبيط الناتج	product inhibition
ثابت تثبيط الناتج	product inhibition constant
إعادة توليد الناتج	product regeneration

Q

حاصل الكم	quantum yield
حالة شبه الاستقرار (مستقرة)	quasi steady state
تقريب حالة شبه الاستقرار	quasi steady state approximation

R

Redox	أكسدة-اختزال
reduced glucose oxidase (GOred)	إنزيم جلوكوز أوكسيداز المختزل
relative sensitivity	حساسية نسبية
response amplification	تكبير الاستجابة
response stability	استقرار الاستجابة
response time prolongation	إطالة زمن الاستجابة
rimosity	تشققيه، تصدعية
rotating disk electrode	إلكترود ذو قرص دوار

S

sandwich-like multi-layer biosensor	حساس حيوي متعدد الطبقات تشبه السندوتش
sarcosine oxidase	إنزيم ساركوسكين أوكسيداز
saturating substrate concentration	تركيز الركيزة المشبعة
Saturation	تشبع
saturation constant	ثابت التشبع
sequential injection analysis	تحليل الحقن المتسلسل

إشارة مكتسبة	signal gain
جسيم (دقيقة) السيليكا	silica particle
استقرارية	Stability
استجابة حساس حيوي مستقر (ساكن)	stationary biosensor response
تركيز ثابت	stationary concentration
تيار ثابت (مستقر)	stationary current
حالة استقرار	steady state
تيار حساس حيوي في حالة الاستقرار	steady state biosensor current
تركيز حالة الاستقرار	steady state concentration
تيار حالة الاستقرار	steady state current
تألق حالة الاستقرار	steady state fluorescence
استجابة حالة الاستقرار	steady state response
تحويل الركيزة الحلقي	substrate cyclic conversion
تثبيط الركيزة	substrate inhibition
ثابت تثبيط الركيزة	substrate inhibition constant
خشونة السطح	surface roughness

synergistic reaction	تفاعل حفاز معاون
synergistic substrates conversion	تحويل بين الحفاز المعاون والركيزة

T

three-layer biosensor	حساس حيوي ثلاثي الطبقات
Tortuosity	تعرج
transducer selectivity	انتقائية المبدل
transition state	حالة انتقالية
tridiagonality	ثلاثية قطرية
trienzyme biosensor	حساس حيوي ثلاثي الإنزيم
Triggering	قدح
two-enzyme biosensor	حساس حيوي ثنائي الإنزيم
two-phase composite	تراكب طورين

U

undersell grounded parameters	بارامترات مؤرضة أقل
unitary tortuosity	تعرج وحدوي

V

vary	تتفاوت، تتنوع، تتغير

Z

تدفق صفري	zero flux