

Model agregacji (wzrostu) biomasy

Maria Gokieli

Nobuyuki Kenmochi i Marek Niezgódka

BIOFIZMAT 5,
IM PAN, 8.12.2016



Uniwersytet Warszawski

1 Modelowanie

- wstęp
- model *sharp interface* (2001)
- relaksacja: ε , δ_0

2 Narzędzia

- równania i nierówności, sformułowanie wariacyjne
- aproksymacja: μ

3 Rozwiązanie

- istnienie rozwiązania przybliżonego
- oszacowanie BV
- twierdzenie o istnieniu

1. Agregacja biomasy — wstęp

- mikroorganizmy żyjące w płynie przyczepiają się do powierzchni
- agregacja
- w płynach, również w wilgotnym powietrzu
- odpowiedzialna za ok. 80% infekcji
- odporna na antybiotyki
- wykorzystywana w geologii, do regulacji przepływów, np. przy wydobyciu ropy



Thermophilic bacteria in the outflow of Mickey Hot Springs, Oregon, approximately 20 mm thick. By Amateria1121 - Own work

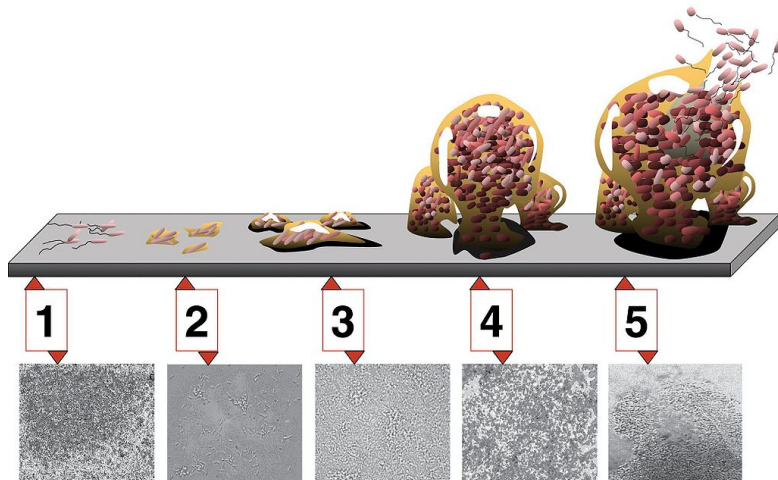
1. Agregacja biomasy — wstęp

- mikroorganizmy żyjące w płynie przyczepiają się do powierzchni
- agregacja
- w płynach, również w wilgotnym powietrzu
- odpowiedzialna za ok. 80% infekcji
- odporna na antybiotyki
- wykorzystywana w geologii, do regulacji przepływów, np. przy wydobyciu ropy



Biofilm removal, Southwest Regional Wound Care Center, Lubbock, Texas

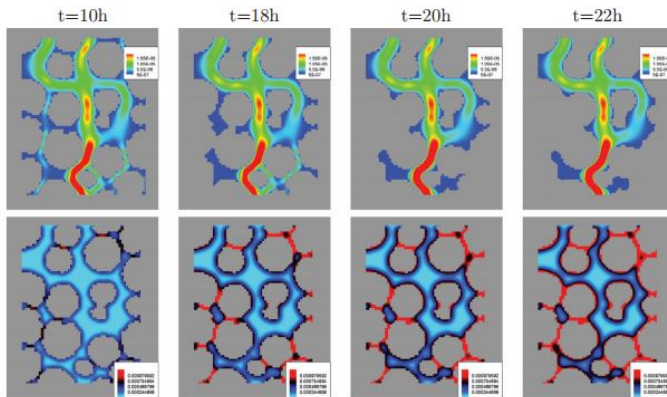
1. Agregacja biomasy — wstęp



D. Davis - From: Looking for Chinks in the Armor of Bacterial Biofilms
Monroe D, PLoS Biology Vol. 5, No. 11, e307

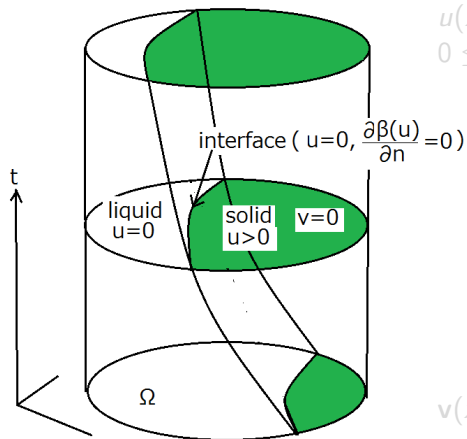
1. Agregacja biomasy — wstęp

Symulacja przepływu w obszarze, w którym następuje wzrost biomasy



M. Peszynska, A. Trykozko et al., Biofilm growth in porous media: Experiments, computational modeling at the porescale, and upscaling, Advances in Water Resources (2015)

1. Agregacja biomasy — Sharp interface model



Ω : obszar ograniczony w \mathbb{R}^3 ,

$\Gamma = \partial\Omega$,

$Q := \Omega \times [0, T]$

$u(x, t)$: gęstość biomasy,
 $0 \leq u(x, t) \leq u^*$ in Q ,

$Q_s \{u > 0\}$

(stan stały),

$Q_\ell = \text{Int} \{u = 0\}$

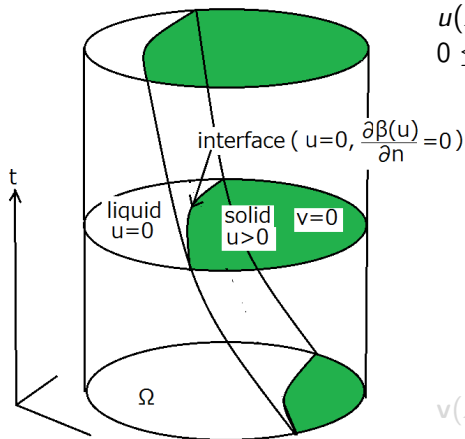
(stan płynny),

$\Sigma_j := \overline{Q_s} \cap \overline{Q_\ell} \cap Q$
(granica),

$v(x, t)$: prędkość płynu w Q_ℓ ,
 $v = 0$ w Q_s

$w(x, t)$: koncentracja pokarmu,
 $0 \leq w(x, t) \leq 1$ in Q

1. Agregacja biomasy — Sharp interface model



Ω : obszar ograniczony w \mathbb{R}^3 ,

$\Gamma = \partial\Omega$,

$Q := \Omega \times [0, T]$

$u(x, t)$: gęstość biomasy,
 $0 \leq u(x, t) \leq u^*$ in Q ,

$Q_s \{u > 0\}$

(stan stały),

$Q_\ell = \text{Int} \{u = 0\}$

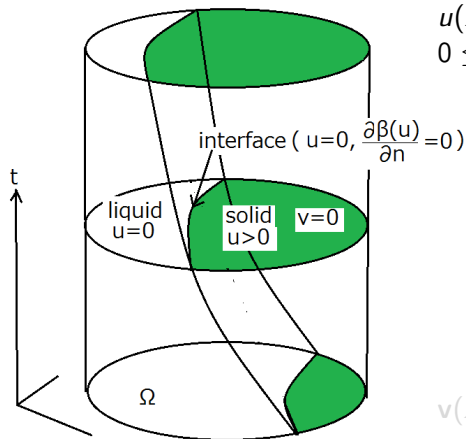
(stan płynny),

$\Sigma_j := \overline{Q_s} \cap \overline{Q_\ell} \cap Q$
(granica),

$v(x, t)$: prędkość płynu w Q_ℓ ,
 $v = 0$ w Q_s

$w(x, t)$: koncentracja pokarmu,
 $0 \leq w(x, t) \leq 1$ in Q

1. Agregacja biomasy — Sharp interface model



Ω : obszar ograniczony w \mathbb{R}^3 ,

$\Gamma = \partial\Omega$,

$Q := \Omega \times [0, T]$

$u(x, t)$: gęstość biomasy,
 $0 \leq u(x, t) \leq u^*$ in Q ,

$Q_s \{u > 0\}$

(stan stały),

$Q_\ell = \text{Int} \{u = 0\}$

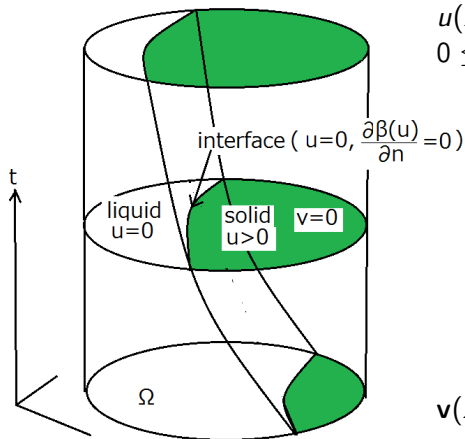
(stan płynny),

$\Sigma_i := \overline{Q_s} \cap \overline{Q_\ell} \cap Q$
(granica),

$v(x, t)$: prędkość płynu w Q_ℓ ,
 $v = 0$ w Q_s

$w(x, t)$: koncentracja pokarmu,
 $0 \leq w(x, t) \leq 1$ in Q

1. Agregacja biomasy — Sharp interface model



Ω : obszar ograniczony w $\underline{\mathbb{R}^3}$,

$\Gamma = \partial\Omega$,

$Q := \Omega \times [0, T]$

$u(x, t)$: gęstość biomasy,
 $0 \leq u(x, t) \leq u^*$ in Q ,

$Q_s \{u > 0\}$

(stan stały),

$Q_\ell = \text{Int} \{u = 0\}$

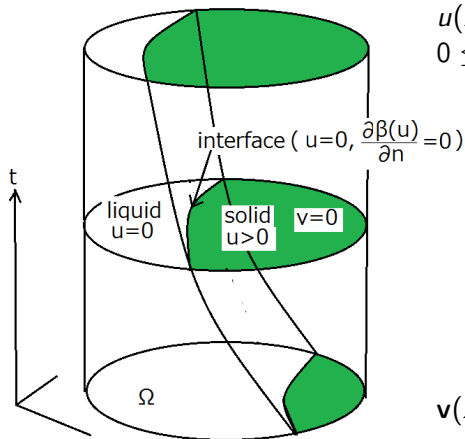
(stan płynny),

$\Sigma_j := \overline{Q_s} \cap \overline{Q_\ell} \cap Q$
(granica),

$\mathbf{v}(x, t)$: prędkość płynu w Q_ℓ ,
 $\mathbf{v} = 0$ w Q_s

$w(x, t)$: koncentracja pokarmu,
 $0 \leq w(x, t) \leq 1$ in Q

1. Agregacja biomasy — Sharp interface model



Ω : obszar ograniczony w $\underline{\mathbb{R}^3}$,

$\Gamma = \partial\Omega$,

$Q := \Omega \times [0, T]$

$u(x, t)$: gęstość biomasy,
 $0 \leq u(x, t) \leq u^*$ in Q ,

$Q_s \{u > 0\}$

(stan stały),

$Q_\ell = \text{Int} \{u = 0\}$

(stan płynny),

$\Sigma_j := \overline{Q_s} \cap \overline{Q_\ell} \cap Q$
(granica),

$\mathbf{v}(x, t)$: prędkość płynu w Q_ℓ ,
 $\mathbf{v} = 0$ w Q_s

$w(x, t)$: koncentracja pokarmu,
 $0 \leq w(x, t) \leq 1$ in Q

1. Model matematyczny oryginalny — Sharp interface

H.J. Eberl, D.F. Parker, M.C.M. van Loosdrecht [3](2001)

$$(M) \quad u_t - \Delta\beta(u) + bu = f(w, u) \quad \text{w } Q,$$

$$(H) \quad \mathbf{v}_t - \nu\Delta\mathbf{v} + (\mathbf{v} \cdot \nabla)\mathbf{v} = -\frac{\nabla P}{\rho}, \quad \operatorname{div} \mathbf{v} = 0, \quad \text{w } Q_\ell,$$
$$\mathbf{v} = 0 \quad \text{in } Q_s,$$

$$(N) \quad w_t - \operatorname{div}(d(u)\nabla w) + \mathbf{v} \cdot \nabla w = -f(w, u) \quad \text{w } Q,$$

(IB) *warunki brzegowe i początkowe dla u, \mathbf{v}, w ,*

- b, ν, ρ stałe dodatnie (dysypacja biomasy, lepkość, gęstość),
- P ciśnienie, $f(w, u)$ funkcja konsumpcji:

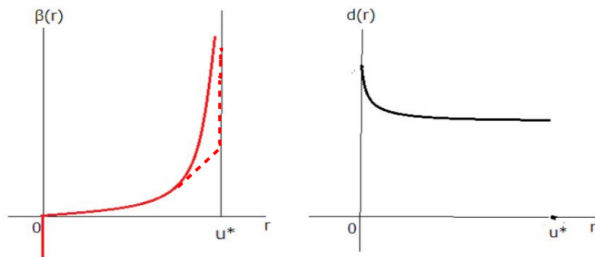
$$f(w, u) = \frac{k_1 w u}{k_2 + w} \quad \text{ze stałymi } k_1, k_2 > 0,$$

- β rosnąca, z degeneracją w 0: $\beta(0) = \beta'(0) = 0$,
- d współczynnik dyfuzji pożywienia — f. ograniczona, dodatnia, gładka.

1. Model matematyczny — funkcje dyfuzji

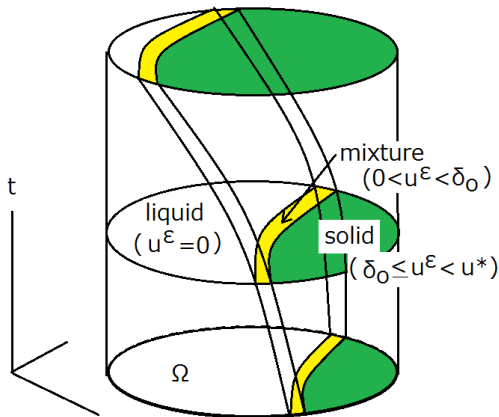
Nasz wybór:

- β rosnąca funkcja wielowartościowa (maks. monotoniczna) na $[0, u^*)$, zdegenerowana w 0: $\beta(0) = \beta'(0) = 0$,
- $d(u)$ ograniczona, dodatnia, gładka funkcja $u \in [0, u^*]$.



1. Relaksacja modelu

Postulujemy istnienie cienkiej (?..) warstwy pomiędzy fazą stałą i płynną.
Określona jest za pomocą uśrednienia u : $u^\varepsilon := \rho_\varepsilon * u$



$$\delta_0 \leq u^\varepsilon(x, t) < u^* \text{ (f.stała)}$$
$$\mathbf{v} = 0$$

$$0 < u^\varepsilon < \delta_0 \text{ (plankton)}$$
$$0 \leq \mathbf{v} \leq p_0(u^\varepsilon)$$

biomasa i faza płynna

$$u^\varepsilon = 0 \text{ (f.płynna)}$$

bez więzów na \mathbf{v}

1. Model z relaksacją

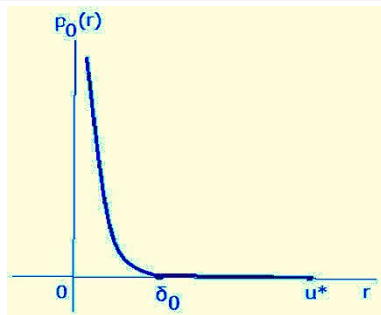
$$(M) \quad u_t - \Delta \beta(u) + \mathbf{v} \cdot \nabla u + bu = f(w, u) \quad \text{w } Q,$$

$$(H) \quad \mathbf{v}_t - \nu \Delta \mathbf{v} (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} = -\frac{\nabla P}{\rho}, \quad |\mathbf{v}| \leq \rho_0(u^\varepsilon(t)), \quad \operatorname{div} \mathbf{v} = 0, \quad \text{w } Q,$$

$$(N) \quad w_t - \operatorname{div}(d(u)\nabla w) + \mathbf{v} \cdot \nabla w = -f(w, u), \quad 0 \leq w \leq 1 \quad \text{w } Q,$$

gdzie $u^\varepsilon = \rho_\varepsilon * u$,

ρ_ε funkcja wygładzająca.



Ze względu na więzy (H) i (N) zapisują się jako nierówności wariacyjne.

2. Narzędzia — narzędzia do sformułowania modelu

Nasz wybór narzędzia do więzów na \mathbf{v} i w : analiza wypukła

- wprowadzamy zbiór

$$K(u^\varepsilon; t) := \{\mathbf{v} \in \mathbf{H}_{0,\sigma}^1(\Omega) : |\mathbf{v}| \leq p_0(u^\varepsilon(\cdot; t))\}$$

- więzy \implies funkcje indykatorowe

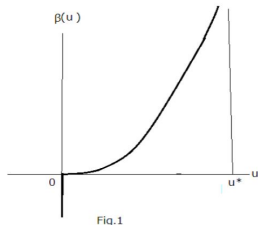
$$I_K(x) = \begin{cases} 0 & \text{gdy } x \in K \\ +\infty & \text{if } x \in \Omega \setminus K \end{cases}$$

- pod-różniczki: jeśli $\varphi : X \rightarrow \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ jest wypukła, półciągła z dołu na X , $u^* \in X^*$, to

$$u^* \in \partial\varphi(u) \Leftrightarrow \langle u^*, z - u \rangle_{(X^*, X)} \leq \varphi(z) - \varphi(u) \quad \forall z \in X$$

- do (H) dodajemy składnik $\partial\varphi^t = \partial I_{K(u^\varepsilon; t)}$,
- użyjemy analizy wypukłej dla φ^t — funkcji zależnych od czasu
- funkcje wielowartościowe, inkluzje
- inkluzje i podróżniczki \Leftrightarrow nierówności wariacyjne

2. Narzędzia – $(M) \rightarrow (M)_\mu$



$$H := L^2(\Omega); \quad V := H^1(\Omega);$$

$$V \subset H \subset V^*, \quad F : V \rightarrow V^*, \text{ duality map,}$$

$$\langle F\tilde{u}, z \rangle := \int_{\Omega} \nabla \tilde{u} \cdot \nabla z dx + n_0 \int_{\Gamma} \tilde{u} z d\Gamma$$

$$(F\tilde{u} \approx -\Delta \tilde{u} \text{ in } \Omega, -\frac{\partial \tilde{u}}{\partial n} = n_0 \tilde{u} \text{ on } \Gamma)$$

Dla $w \in L^2(0, T; V)$, $u_0 \in H$ mamy równanie:

$$(M; w, \mathbf{v})_\mu \left\{ \begin{array}{l} u \in W^{1,2}(0, T; V^*), \quad \tilde{u} \in L^2(0, T; V), \quad \tilde{u} \in \beta(u) \text{ p.w. w } Q, \\ u'(t) + F\tilde{u}(t) + \mathbf{v}(t) \cdot \nabla(\rho_\mu \star u)(t) + bu(t) \\ \qquad \qquad \qquad = f(\rho_\mu \star w(t), u(t)) \text{ w } V^*, \\ u(\cdot, 0) = u_0 \text{ w } V^*. \end{array} \right.$$

Cf. Brézis [1] (1973), Damlamian-Kenmochi [2] (1999).

2. Narzędzia — $(H) \rightarrow (H)_{\mu}^{\varepsilon}$

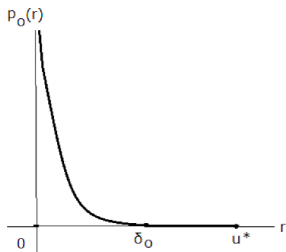
Przestrzenie solenoidalne:

$$\mathbf{H}_{\sigma} := \{ \mathbf{z} \in (L^2(\Omega))^3 \mid \operatorname{div} \mathbf{z} = 0 \text{ w } \Omega \},$$
$$\mathbf{z} := (z^{(1)}, z^{(2)}, z^{(3)}),$$

$$\mathbf{V}_{\sigma} := \{ \mathbf{z} \in (H_0^1(\Omega))^3 \mid \operatorname{div} \mathbf{z} = 0 \text{ w } \Omega \},$$

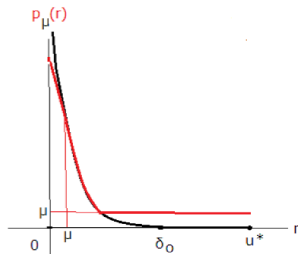
\mathbf{V}_{σ}^* : przestrzeń dualna do \mathbf{V}_{σ} ,

$\mathbf{V}_{\sigma} \subset \mathbf{H}_{\sigma} \subset \mathbf{V}_{\sigma}^*$ zanurzenia zwarte.



$0 \leftarrow \mu$

Fig.4



2. Narzędzia — $(H) \rightarrow (H)_\mu^\varepsilon$

Nierówność wariacyjna typu Naviera–Stokesa

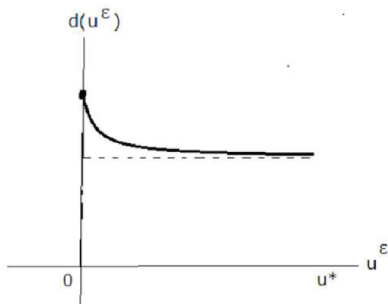
$$(H; u^\varepsilon)_\mu \left\{ \begin{array}{l} \mathbf{v} \in W^{1,2}(0, T; \mathbf{H}_\sigma), |\mathbf{v}| \leq p_\mu(u^\varepsilon) \text{ p.w. w } Q; \\ \int_\Omega \mathbf{v}'(t) \cdot (\mathbf{v}(t) - \eta) dx + \nu \int_\Omega \nabla \mathbf{v}(t) \cdot \nabla (\mathbf{v}(t) - \eta) dx \\ \quad + \int_\Omega (\mathbf{v}(t) \cdot \nabla) \mathbf{v}(t) \cdot (\mathbf{v}(t) - \eta) dx \leq 0, \\ \quad \forall \eta \in \mathbf{V}_\sigma, |\eta| \leq p_\mu(u^\varepsilon(\cdot, t)) \text{ p.w. w } \Omega, \\ \mathbf{v}(\cdot, 0) = \mathbf{v}_0 \text{ in } \mathbf{H}_\sigma, \end{array} \right.$$

Cf. Fukao-Kenmochi [3](2015).

2. Narzędzia — $(N) \rightarrow (N)_\mu$

Nierówność wariacyjna:

$$(N; u, \mathbf{v})_\mu \left\{ \begin{array}{l} w \in W^{1,2}(0, T; H) \cap C([0, T]; V), \quad 0 \leq w \leq 1; \\ (w'(t), w(t) - z) + \int_{\Omega} d(\rho_\mu \star u(t)) \nabla w(t) \cdot \nabla (w(t) - z) dx \\ + \int_{\Omega} \mathbf{v}(t) \cdot \nabla w(t) (w(t) - z) dx \leq -(f(w(t), u(t)), w(t) - z), \\ \quad \forall z \in V, \quad 0 \leq z \leq 1, \\ w(0) = w_0. \end{array} \right.$$



2. Narzędzia — aproksymacja całości

Ustalamy $\varepsilon > 0$ oraz bierzemy $\mu > 0$ jako parametr aproksymacji.

$\{u_\mu, \mathbf{v}_\mu, w_\mu\}$ jest rozwiązaniem P_μ^ε ,

jeśli u_μ, \mathbf{v}_μ i w_μ spełniają układ $(M; w_\mu, \mathbf{v}_\mu)_\mu, (H; u_\mu^\varepsilon)_\mu, (N; u_\mu, \mathbf{v}_\mu)_\mu$.

Cf. Fukao-Kenmochi [3](2015) i Kenmochi -Nieżgódka [4](2016).

3. Rozwiązanie — dla aproksymacji $\mu > 0$

Zalóżmy, że

$$u_0 \in H, \hat{\beta}(u_0) \in L^1(\Omega) \text{ (stąd } 0 \leq u_0 \leq u^*),$$

$$\mathbf{v}_0 \in \mathbf{V}_\sigma \cap \mathbf{C}(\bar{\Omega}),$$

$$\mathbf{v}_0 = 0 \text{ w pobliżu } \overline{\{x \in \Omega \mid u_0^\varepsilon(x) > \delta_0\}}$$

$$w_0 \in V, 0 \leq w_0 \leq 1.$$

Wówczas:

Dla małych $\mu > 0$ zagadnienie P_μ^ε ma co najmniej jedno rozwiązanie $\{u_\mu, \mathbf{v}_\mu, w_\mu\}$.

3. Rozwiązanie— dla aproksymacji $\mu > 0$

Dowód. Twierdzenie Schaudera o punkcie stałym dla \mathcal{S} :

$$\begin{array}{ccc} u_\mu \longrightarrow \mathbf{v}_\mu \text{ rozwiązując } (H; u_\mu)^\varepsilon & \longrightarrow & w_\mu \text{ rozwiązując } (N; u_\mu, \mathbf{v}_\mu) \\ \uparrow & & \downarrow \\ \uparrow \bar{u}_\mu = \mathcal{S}u_\mu & & \downarrow \\ \longleftarrow \longleftarrow \longleftarrow \longleftarrow \longleftarrow \longleftarrow \longleftarrow \longleftarrow & & \bar{u} \text{ rozwiązując } (M; w_\mu, \mathbf{v}_\mu) \end{array}$$

3. Rozwiązanie: zbieżność $\mu \rightarrow 0$, ε ustalony

Istnieje ciąg $\mu_n \rightarrow 0$ taki że

$u_{\mu_n} \rightarrow u$ słabo w $W^{1,2}(0, T; V^*)$, $u_{\mu_n}(t) \rightarrow u(t)$ słabo w H ,

$w_{\mu_n} \rightarrow w$ w $C([0, T]; V)$, słabo w $W^{1,2}(0, T; H)$,

$\mathbf{v}_{\mu_n} \rightarrow \mathbf{v}$ w $L^2(0, T; \mathbf{H}_\sigma)$ i słabo w $L^2(0, T; \mathbf{V}_\sigma)$.

3. Rozwiązanie: zbieżność $\mu \rightarrow 0$, oszacowanie BV

Granica $\{u, \mathbf{v}, w\}$ spełnia $(M; w)$, $(N; u, \mathbf{v})$ oraz

$$\mathbf{v} = 0 \quad \text{p.w. w } Q(u^\varepsilon \geq \delta_0) \text{ (faza stała);}$$

i dla każdego $\eta \in \mathcal{K}(u^\varepsilon)$

$$\begin{aligned} & \int_0^t (\eta', \mathbf{v} - \eta)_\sigma d\tau + \nu \int_0^t \int_\Omega \nabla \mathbf{v} \cdot \nabla (\mathbf{v} - \eta) dx d\tau \\ & + \int_0^t \int_\Omega (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} \cdot (\mathbf{v} - \eta) dx d\tau + \frac{1}{2} |\mathbf{v}(t) - \eta(t)|_{\mathbf{H}_\sigma}^2 \leq \frac{1}{2} |\mathbf{v}_0 - \eta(0)|_{\mathbf{H}_\sigma}^2, \end{aligned}$$

$$(\mathbf{v}, \eta)_\sigma \in BV(0, T), \quad (\mathbf{v}(0), \eta(0))_\sigma = (\mathbf{v}_0, \eta(0))_\sigma,$$

gdzie

$$\mathcal{K}(u^\varepsilon) := \left\{ \eta \in C^1([0, T]; \mathbf{W}_{0,\sigma}^{1,4}(\Omega)) \mid \begin{array}{l} \text{supp}(\eta) \subset Q(u^\varepsilon < \delta_0), \\ |\eta| \leq p_0(u^\varepsilon) \text{ w } Q \end{array} \right\}.$$

Dziękuję za uwagę

0. MG, N. Kenmochi, M. Niezgodka (2017?), Variational Inequalities of Navier-Stokes Type with Time Dependent Constraints, to appear
1. H. Brézis (1973), Opérateurs Maximaux Monotones et Semi-groupes de Contractions dans les espaces de Hilbert, Math. Studies 5, North-Holland.
2. A. Damlamian and N. Kenmochi (1999), Evolution equations generated by subdifferentials in the dual space of $H^1(\Omega)$, Disc. Cont. Dy. Systems, 5, 269-278.
3. H.J. Eberl, D.F. Parker and M.C.M. van Loosdrecht (2001), A new deterministic spatio-temporal continuum model for biofilm development, J. Theoretical Medicine, 3, 161-175.
4. T. Fukao and N. Kenmochi (2015), Quasi-variational inequalities approach to heat convection problems with temp. dependent velocity constraint, DCDS, 35, 2523-2538.
5. N. Kenmochi and M. Niezgodka (2016), Weak solvability for parabolic variational inclusions and application to quasi-variational problems, Adv.Math.Sci.Appl., 25, to appear.
6. M. Peszynska, A. Trykozko, G. Iltis and S. Schlueter (2015), Biofilm growth in porous media, Advances in Water Resources, 1-14.

Dziękuję za uwagę

