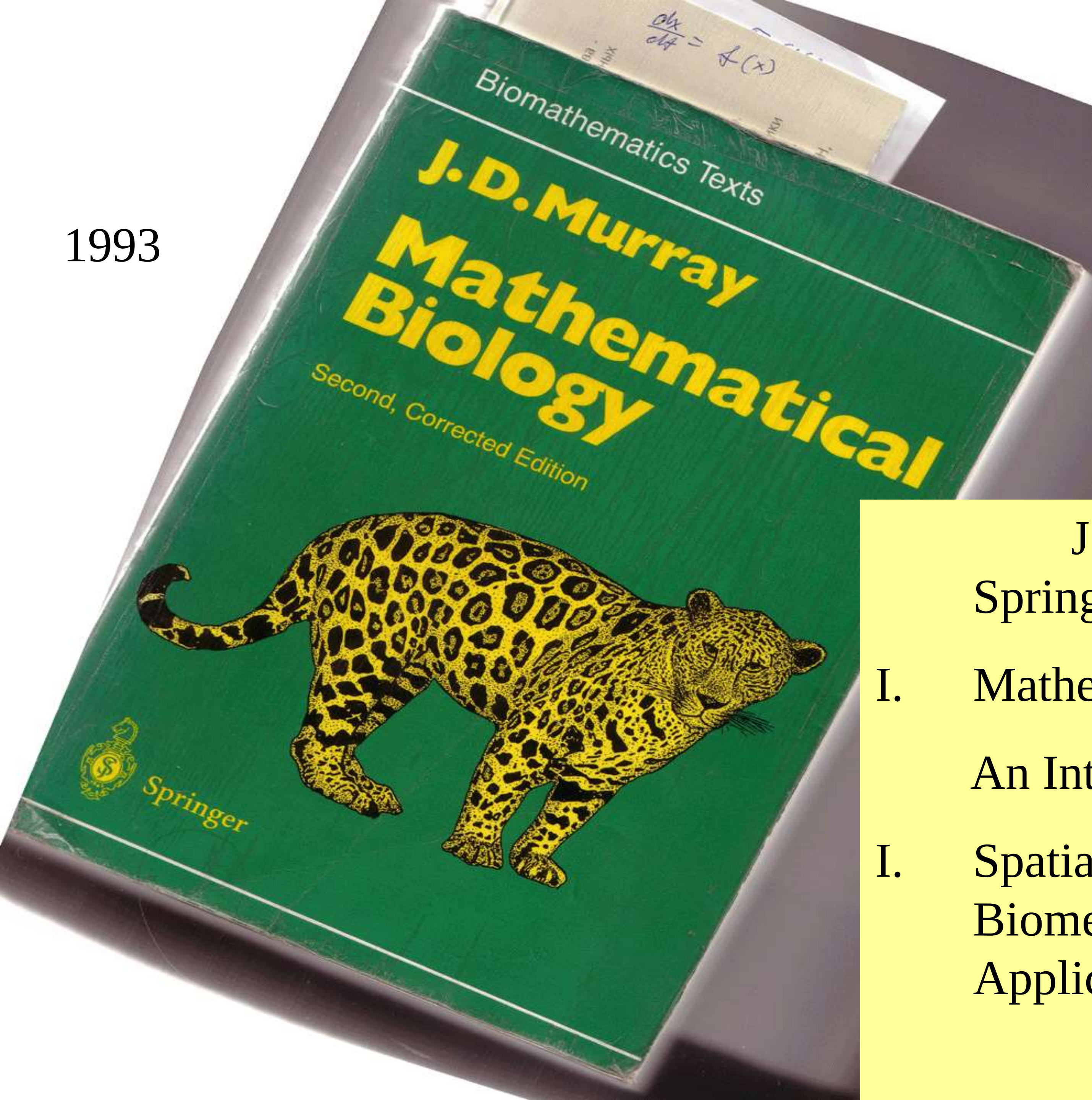
Г.Ю.Ризниченко

РАСПРЕДЕЛЕННЫЕ СИСТЕМЫ (1)

Самоорганизация в пространстве:

- Нарушения симметрии при развитии эмбриона из яйцеклетки.
- Дифференцировка клеток и тканей.
- Возникновение органов. Раскраска шкур животных

1993

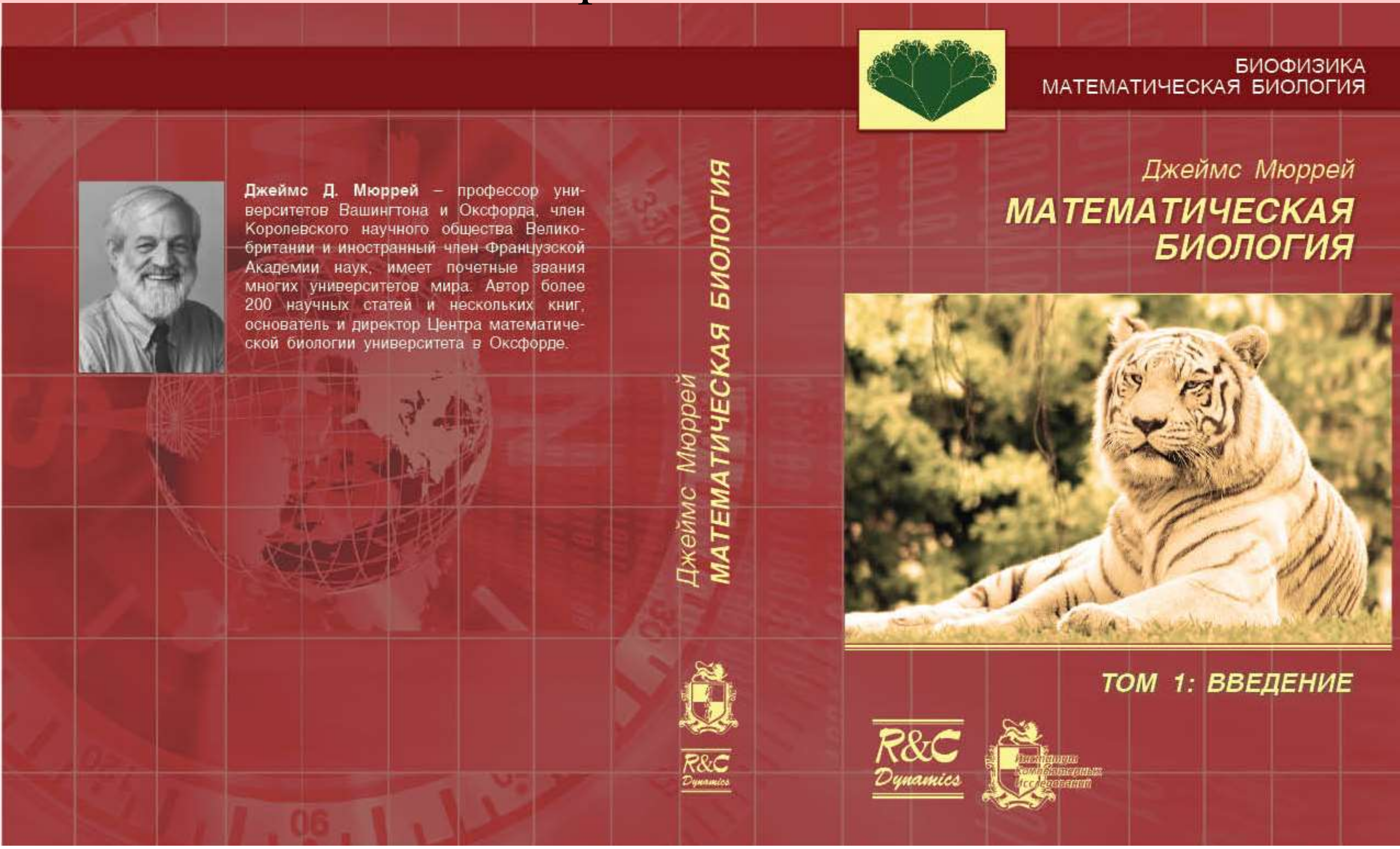


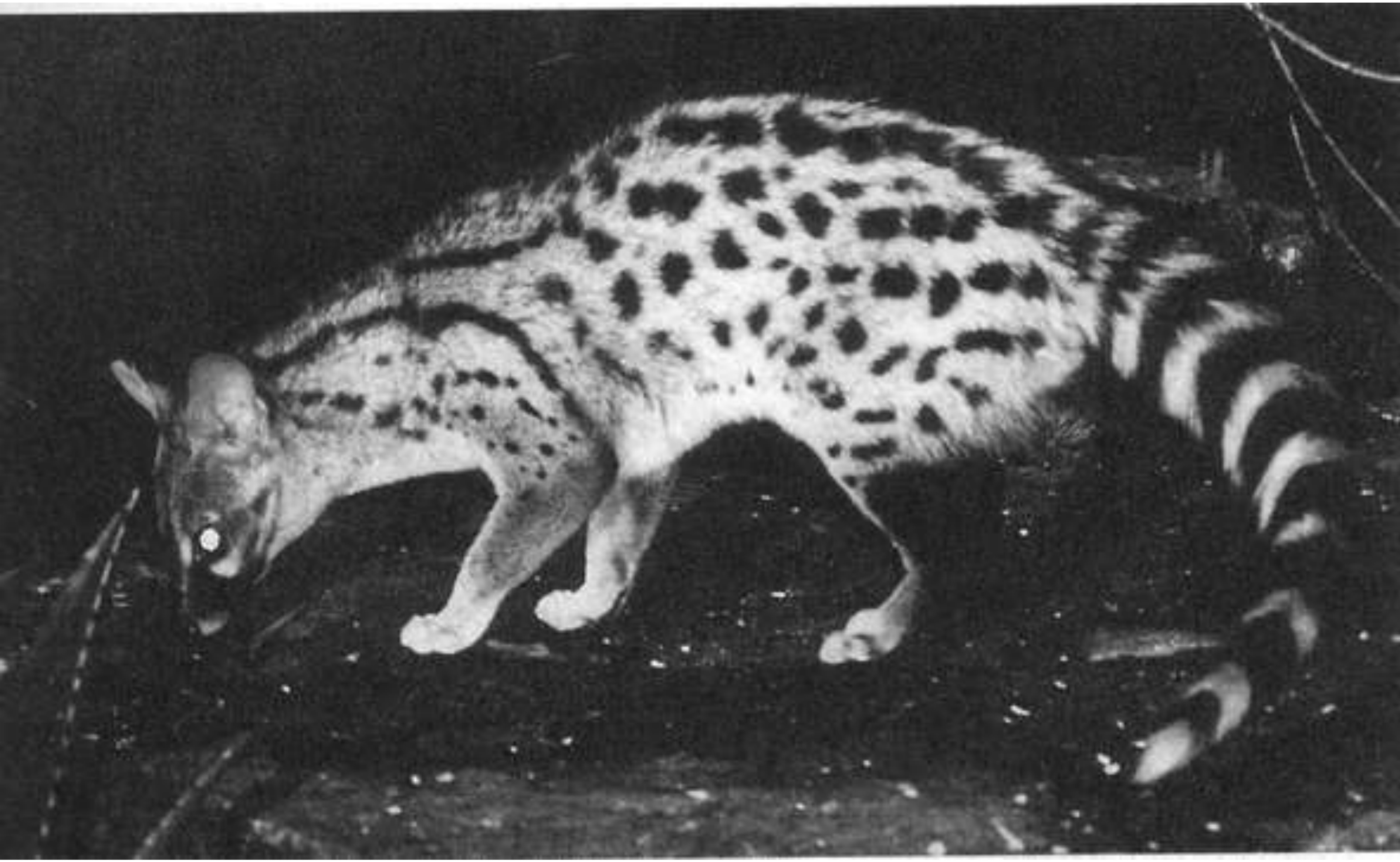
J.D.Murray.
Springer

I. Mathematical biology.
An Intriduction. 2003

I. Spatial models and Biomedical Applications. 2004

Перевод: Д.Мюррей 1. Введение, 2.Пространственные модели и биомедицинские приложения

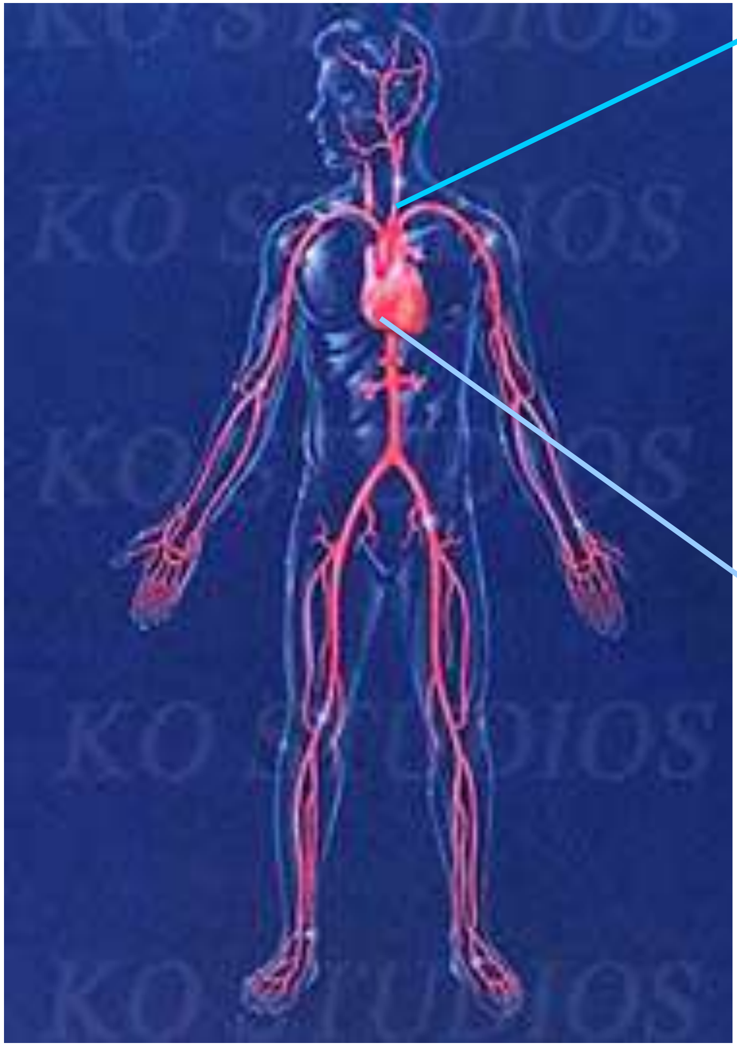


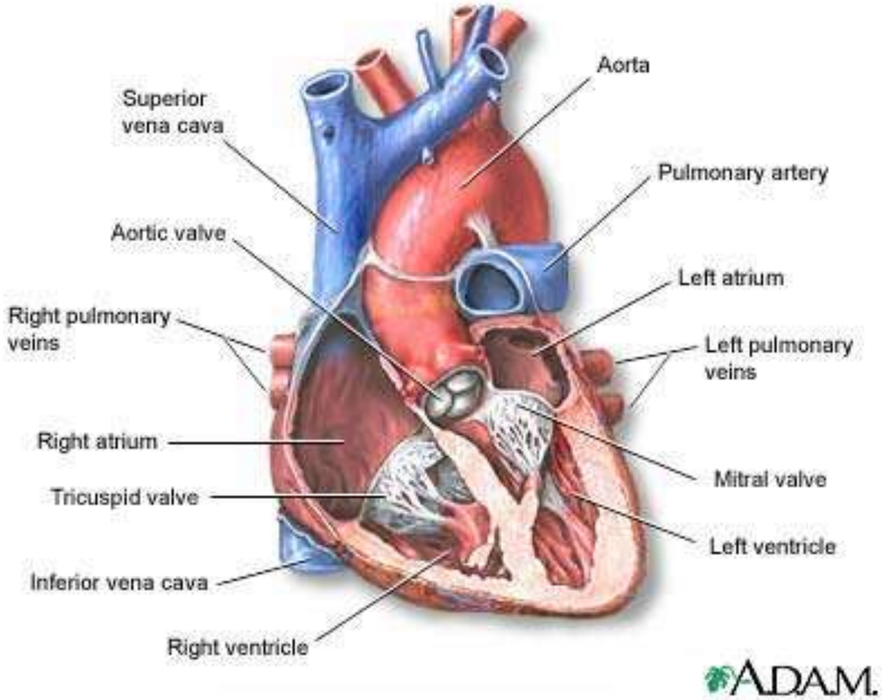


Распространение волн возбуждения

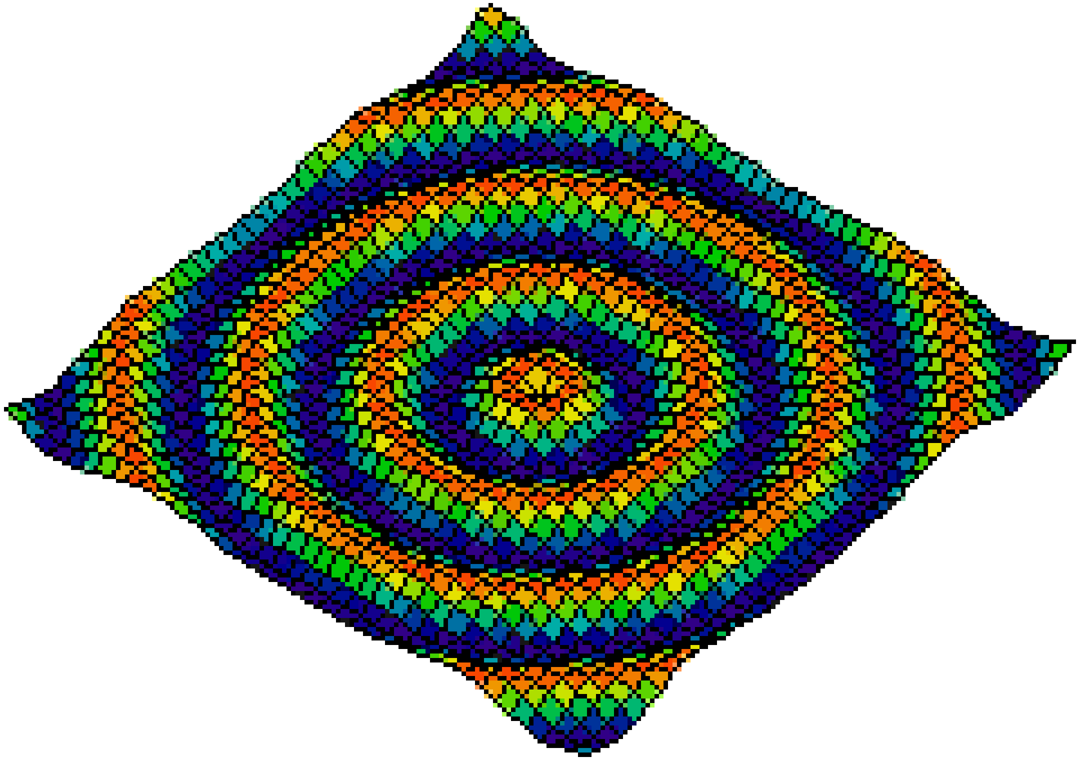
- Распространение нервного импульса
- Возбудимая ткань сердца
- Сокращение стенок сосудов (артерий)
- Сокращение стенок отделов желудочно-кишечного тракта
- Волны в мозгу

Строение сердца

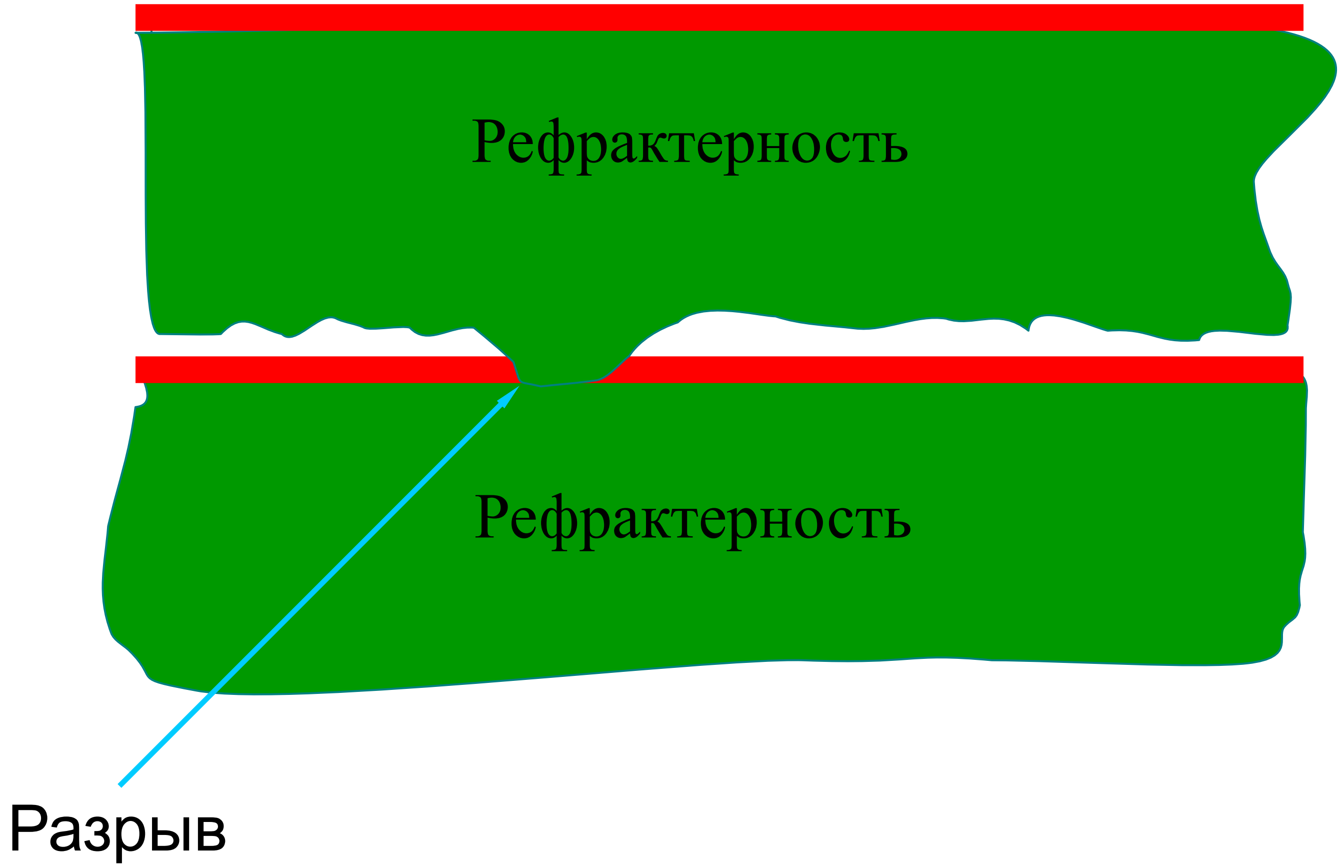




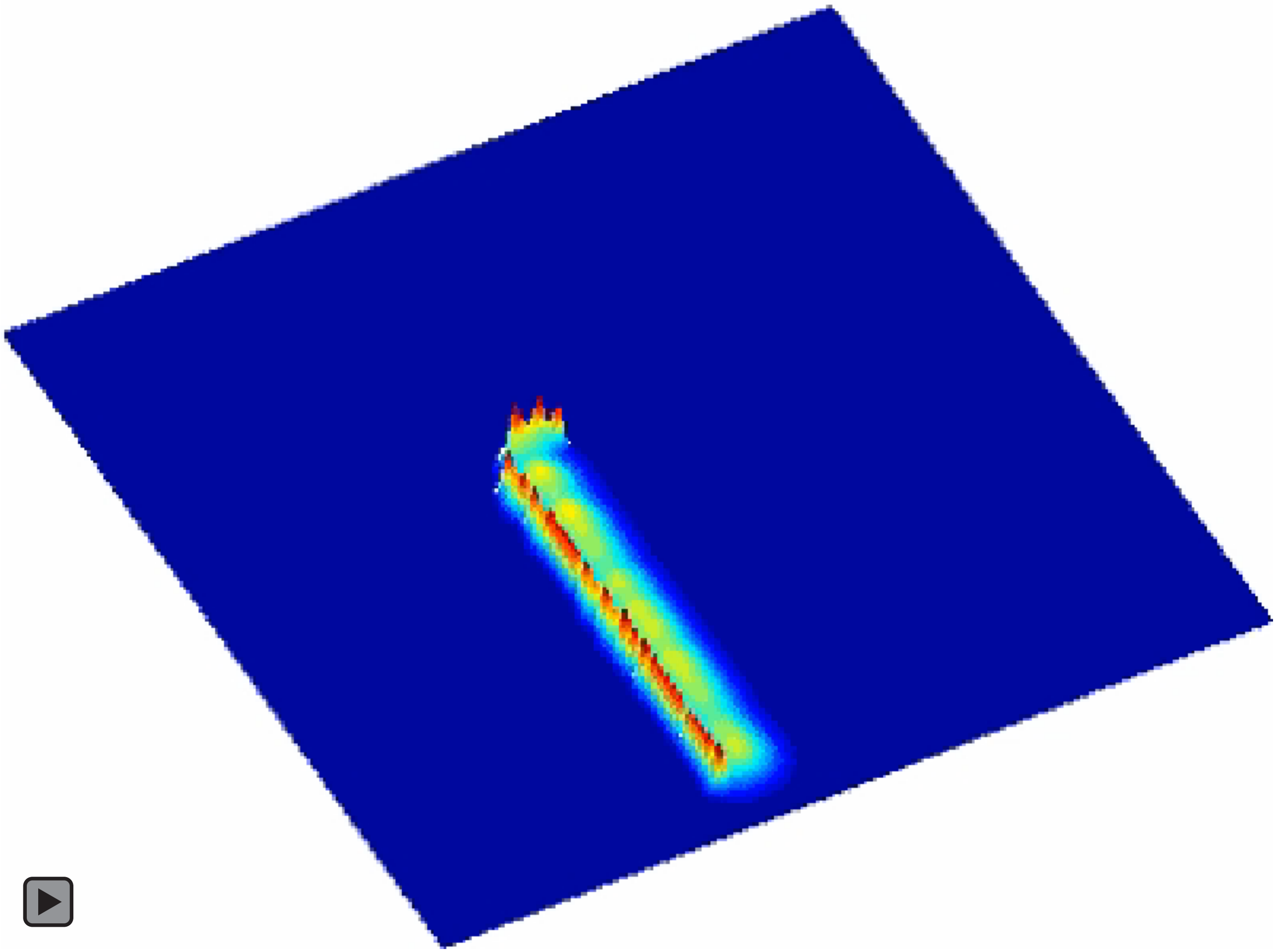
Волна возбуждения. В середине – ведущий центр



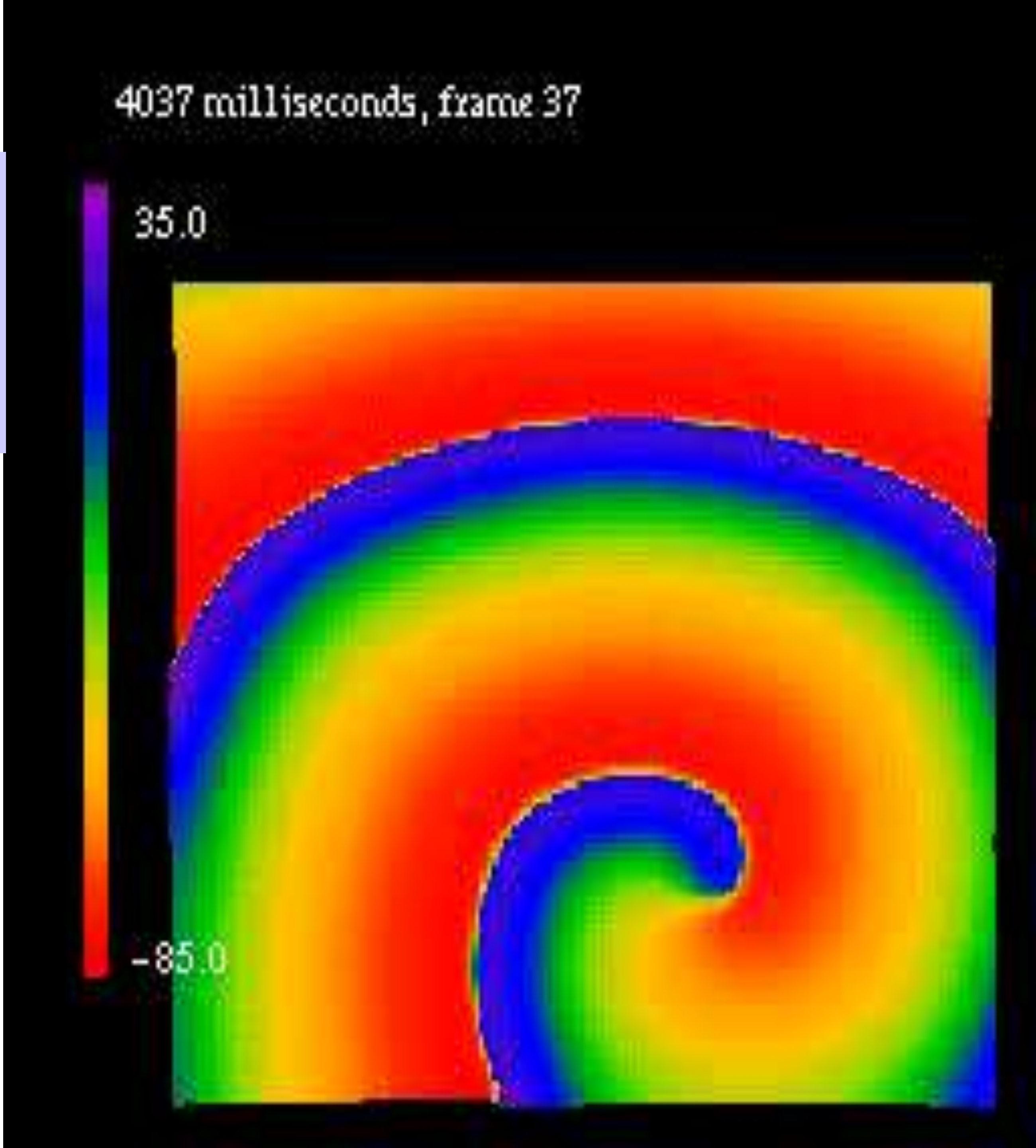
Разрыв волны возбуждения



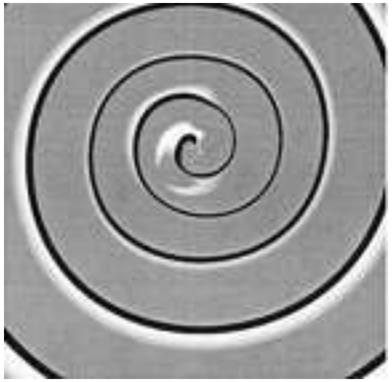
Разрыв фронта и возникновение спиральной волны



Спиральная волна

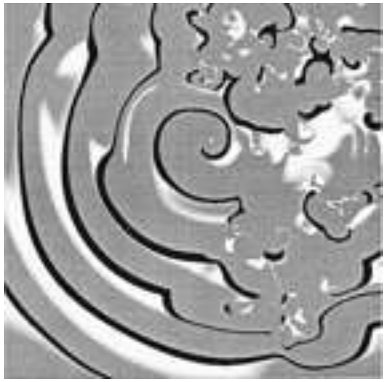


Рождение множества волн (т.е. *пространственно-временного хаоса*) – фибрилляция

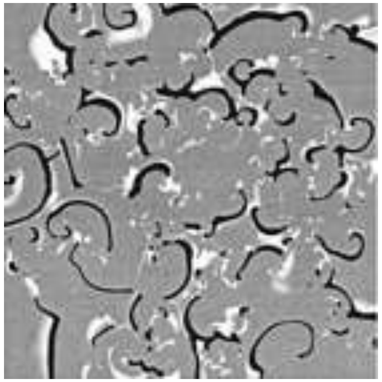


а. Исходная спиральная волна

б. Начало распада (в центре)



в. Увеличение области хаотического поведения



г. Конечная стадия распада спиральных волн

Процессы самоорганизации

- описываются системами нелинейных дифференциальных уравнений в частных производных вида:

$$\frac{\partial x_i}{\partial t} = F_i\left(x_1, x_2, \ldots, x_n\right) + \frac{\partial}{\partial r}\left(\sum_{j=1}^{n} D_{ij}\frac{\partial x_j}{\partial r}\right),$$

- $i = 1,2,\ldots, n$ Здесь Di и Dij $(i \neq j)$ - коэффициенты диффузии и взаимной диффузии, Fi - нелинейные функции, описывающие взаимодействие компонентов.

Активные среды

- а) существует распределенный источник энергии или веществ, богатых энергией;

- б) каждый элементарный объем среды находится в состоянии, далеком от термодинамического равновесия, т.е. является открытой термодинамической системой, в которой диссипирует (рассеивается в тепло) часть энергии, поступающей из распределенного источника;

- в) связь между соседними элементарными объемами осуществляется за счет процессов переноса.

Типы пространственно-временного поведения в активных средах (1)

- Распространяющиеся возмущения в виде бегущего импульса.
- Генерация волн автономными источниками импульсной активности.
- В качестве источников волн могут выступать либо неоднородности среды, вызванные отклонением значений параметров системы из-за механических либо других повреждений, либо локальные кратковременные флуктуации переменных (источники типа "ведущий центр").

Стоячие волны.

Типы пространственно-временного поведения в активных средах (2)

- Синхронные автоколебания во всем пространстве. Синхронизация происходит с частотой того элемента пространства, который обладает наименьшим периодом колебаний.
- Квазистохастические волны, которые могут быть связаны с динамическим хаосом в локальной системе, но могут и возникать в распределенной системе с устойчивыми локальными элементами.
- Стационарные неоднородные распределения переменных в пространстве – диссипативные структуры.

$$\frac{\partial x_i}{\partial t} = F_i\ (x_1, x_2, ..., x_n) + \frac{\partial}{\partial r}\left(\sum_{j=1}^{n} D_{ij} \frac{\partial x_j}{\partial r}\right),$$

Уравнение диффузии. Закон Фика

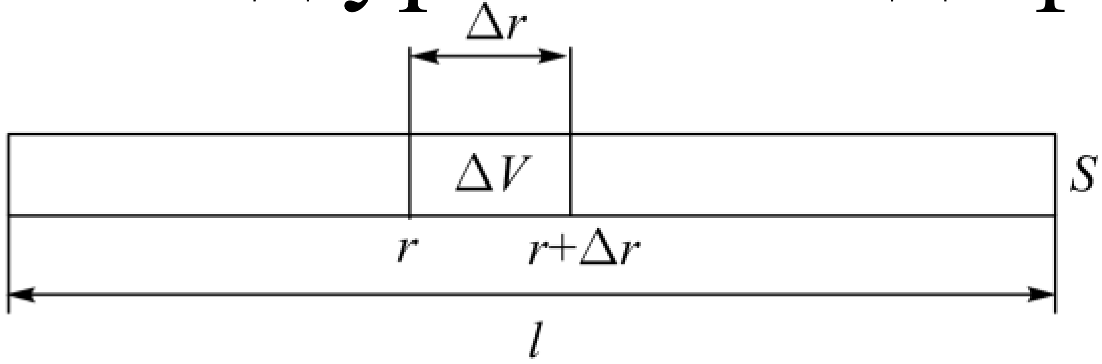
диффузионный поток какого-либо компонента, т.е. масса диффундирующего компонента, проходящая в единицу времени через единицу площади, перпендикулярной к направлению диффузии, пропорционален градиенту концентрации этого компонента, взятому с обратным знаком (закон Фика):

$$I = -D\frac{\partial C}{\partial r}.$$

Фик Адольф Ю́джин (Fick Adolf Eugen, 1829-1901) – немецкий физик и физиолог, сформулировал закон диффузии, изобретатель контактных линз.

$$\frac{\partial x_i}{\partial t} = F_i\left(x_1, x_2, ..., x_n\right) + \frac{\partial}{\partial r}\left(\sum_{j=1}^{n} D_{ij}\frac{\partial x_j}{\partial r}\right),$$

Вывод уравнения диффузии



$$\Delta M_r = -D\frac{\partial C(r,t)}{\partial r}S\Delta t \qquad \Delta M_{r+\Delta r} = -D\frac{\partial C(r+\Delta r,t)}{\partial r}S\Delta t$$

$$\Delta M = \Delta M_r - \Delta M_{r+\Delta r}, \qquad \Delta M = \left[D\frac{\partial C(r+\Delta r,t)}{\partial r} - D\frac{\partial C(r,t)}{\partial r}\right]S\Delta t.$$

$$\Delta C = \frac{\Delta M}{\Delta V} = \frac{\Delta M}{S\Delta r} = \frac{D\frac{\partial C(r+\Delta r,t)}{\partial r} - D\frac{\partial C(r,t)}{\partial r}}{\Delta r}\Delta t$$

$$\Delta r \to 0 \qquad \Delta C = \frac{\partial}{\partial r}\left(D\frac{\partial C(r,t)}{\partial r}\right)\Delta t$$

$$\Delta t \to 0 \qquad \frac{\partial C(r,t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial r}\left(D\frac{\partial C(r,t)}{\partial r}\right)$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D\frac{\partial^2 C}{\partial r^2} + F(r,t)$$

$F(r,t)$ – функция источника

Уравнения реакции-диффузии

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = f_i(C_1,\ C_2,\ldots C_n) + D_i \frac{\partial^2 C_i}{\partial r^2}$$

Начальные и граничные условия

Начальные и граничные (краевые) условия

Начальные условия

$C_i(t_0, r) = \varphi_i(r).$

Граничные условия

1 рода – заданы концентрации

$C(0, t) = \mu_1(t)$

$C(l, t) = \mu_2(t)$

2 рода – заданы потоки

$$\frac{\partial C}{\partial r}(0,t) = \nu_1(t) \qquad \frac{\partial C}{\partial r}(l,t) = \nu_2(t)$$

Например, в начале трубки

$$I(0,t) = -D\frac{\partial C}{\partial r}(0,t)$$

$$\nu(t) = -\frac{I(0,t)}{D}$$

3 рода. На краю трубки задано линейное соотношение между производной и функцией

$$\frac{\partial C}{\partial r}(0,t) = -\lambda\left[C(0,t) - \theta(t)\right]$$

θ – заданная функция.

В большом объеме граничные условия не влияют на малых временах. Все определяется начальным распределением веществ

Этапы решения краевой задачи для уравнения диффузии

Андрей Николаевич Тихонов 1906-1993

Александр Андреевич Самарский 1919-2008

$$C_t = DC_{rr} + f(r, t)$$

$$C(r,0) = \varphi(r)$$

$$C(0, t) = \mu_1(\mathrm{t}); \quad C(l, t) = \mu_2(\mathrm{t})$$

1. Решение однородного уравнения с нулевыми граничными условиями $C(0, t) = 0$; $C(l, t) = 0$.
и заданным начальным условием $C(r,0) = \varphi(r)$.

Уравнения Математической физики

2. Решение неоднородного уравнения с нулевыми граничным условиями

3. Решение неоднородного уравнения с заданными граничными условиями

Решение однородного уравнения Метод разделения переменных

$$C_t = DC_{rr}$$

$$C_t = DC_{rr} + f(r, t)$$

Начальное условие: $C(r, 0) = \varphi(r)$.

нулевые краевые условия: $C(0, t) = 0$; $C(l, t) = 0$

Ищем решение в виде: $C(r, t) = R(r)T(t)$.

$R(r)$ – функция только пространственной переменной r,
$T(t)$ – функция только переменной времени t.

Метод разделения переменных

$$T'R = DTR''$$

$$C_t = DC_{rr} + f(r, t)$$

$$\frac{1}{D}\frac{T'}{T} = \frac{R''}{R} = -\lambda$$

$$C_t = DC_{rr}$$

$$C(r, t) = R(r)T(t).$$

$$R''(r) + \lambda R(r) = 0,$$

Уравнения для R

$$T'(t) + D\lambda T(t) = 0.$$

Уравнение для T

Уравнение для R
Задача Штурма-Лиувилля о собственных значениях и собственных функциях

$$C_t = DC_{rr}$$

$$C(r, t) = R(r)T(t).$$

$$R''(r) + \lambda R(r) = 0,$$

Граничные условия: $R(0) = R(l) = 0,$

$$R(r) = C_1 e^{\sqrt{-\lambda} r} + C_2 e^{-\sqrt{-\lambda} r}$$

При $\lambda \le 0$ задача не имеет нетривиальных решений.
При $\lambda > 0$ общее решение содержит мнимые показатели и поэтому может быть записано в виде $R(r) = D_1 \cos\sqrt{\lambda} r + D_2 \sin\sqrt{\lambda} r$

Краевые условия (14.9) дают:
$R(0) = D_1 = 0,$

$$R(l) = D_2 \sin\sqrt{\lambda} l = 0$$

$$\sin\sqrt{\lambda} l = 0 \qquad \sqrt{\lambda} = \frac{\pi n}{l}$$

n – целое число

Собственные значения и собственные функции

Волновое число

$$R(l) = D_2 \sin\sqrt{\lambda} l = 0$$

k= $\sqrt{\lambda_n} = \dfrac{\pi n}{l}$

$$\sqrt{\lambda} = \frac{\pi n}{l}$$

Таким образом, нетривиальные решения задачи возможны лишь при значениях

$$\lambda_n = \left(\frac{\pi n}{l}\right)^2$$

Собственные значения

$$R_n(r) = D_n \sin\frac{n\pi}{l} r$$

Собственные функции

Уравнение для T:

$$T'(t) + D\lambda T(t) = 0$$

$$C_t = DC_{rr}$$

$$C(r,t) = R(r)T(t).$$

Для каждого n:

$$T_n(t) = A_n e^{-D\lambda_n t}$$

$$\lambda_n = \left(\frac{\pi n}{l}\right)^2$$

$$C_n(r,t) = R_n(r)\cdot T_n(t) = A_n e^{-D\lambda_n t} \sin\frac{\pi n}{l} r$$

$k_n = \dfrac{\pi n}{l}$ является «частотой колебания» переменной C в пространстве

$$\Lambda_n = \frac{2\pi}{k_n}$$

Длина волны n-й гармоники

$$e^{-\left(\frac{\pi n}{l}\right)^2 Dt}$$

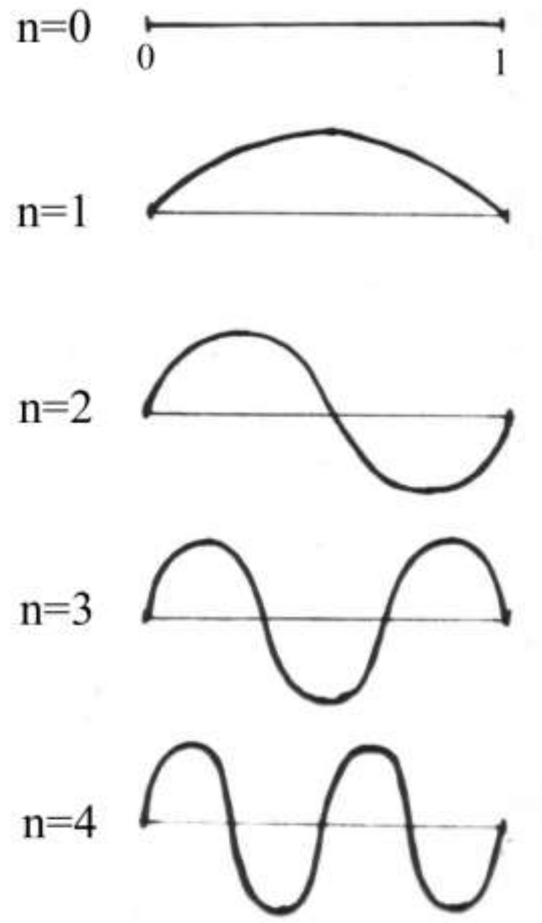
Коэффициент затухания

Линейное уравнение диффузии с нулевыми граничными условиями

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D\frac{\partial^2 c}{\partial r^2}$$

$$C(r,t) = \sum_{n=1}^{\infty} A_n e^{-\left(\frac{\pi n}{l}\right)^2 Dt} \sin\frac{\pi n}{l} r$$

$$C(r,t) = \sum_{=1}^{\infty} A_n e^{p_n t} e^{i k_n r}$$



Собственные функции

Учет начальных условий

$$C_t = DC_{rr}$$

Начальное условие: $C(r, 0) = \varphi(r)$.

$$\varphi(r) = C(r,0) = \sum_{n=1}^{\infty} A_n \sin\frac{\pi n}{l} r$$

A_n представляют собой коэффициенты *разложения в ряд Фурье* функции $\varphi(r)$ по синусам в интервале $(0, l)$:

$$A_n = \varphi_n = \frac{2}{l}\int_0^l \varphi(\xi)\sin\frac{\pi n}{l}\xi\, d\xi$$

Решение однородного уравнения с ненулевыми начальными условиями

Общее решение

A_n находим из начальных условий

$$C(r,t)=\sum_{n=1}^{\infty} A_n e^{-\left(\frac{\pi n}{l}\right)^2 Dt}\sin\frac{\pi n}{l}r$$

$$A_n=\varphi_n=\frac{2}{l}\int_0^l \varphi(\xi)\sin\frac{\pi n}{l}\xi\, d\xi$$

$$C(r,t)=\int_0^l\left[\frac{2}{l}\sum_{n=1}^{\infty} e^{-\left(\frac{\pi n}{l}\right)^2 Dt}\sin\frac{\pi n}{l}r\cdot\sin\frac{\pi n}{l}\xi\right]\varphi(\xi)d\xi$$

Функция мгновенного источника

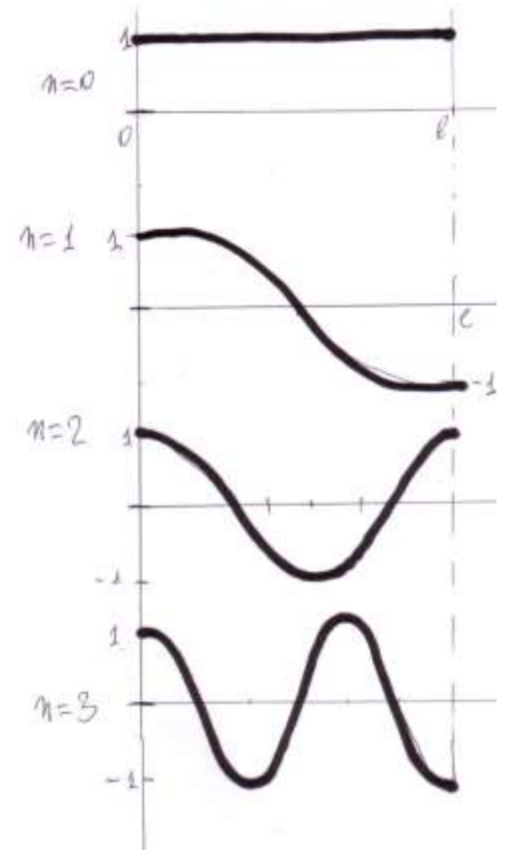
$$G(r,\xi,t)=\frac{2}{l}\sum_{n=1}^{\infty}e^{-\left(\frac{\pi n}{l}\right)^2 Dt}\sin\frac{\pi n}{l}r\cdot\sin\frac{\pi n}{l}\xi$$

характеризует распределение вещества в трубке $0 \le r \le l$ в момент времени t, если в начальный момент времени концентрация вещества равна нулю, и в этот момент в точке $r = \xi$ мгновенно выделяется некоторое количество вещества, а концентрация вещества на концах трубки все время поддерживается нулевой.

$$C(r,t)=\int_0^l G(r,t,\xi)\varphi(\xi)d\xi$$

Нулевые потоки на границах
замкнутая система

Собственные функции



$$R_n = D_n \cos \frac{\pi n}{l} r$$

$$C(r,t) = \int_0^l \left[\frac{2}{l} \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\left(\frac{\pi n}{l}\right)^2 Dt} \cos \frac{\pi n}{l} r \cdot \cos \frac{\pi n}{l} \xi \right] \varphi(\xi) d\xi,$$

Решение задачи с источниками (стоками)

$$C_t = DC_{rr} + f(r, t)$$

Ищут решение с нулевым начальным и нулевыми краевыми условиями

Ищут решение в виде $$C(r,t) = \sum_{n=1}^{\infty} C_n(t) \sin\frac{\pi n}{l} r.$$

$$f(r,t) = \sum_{n=1}^{\infty} f_n(t) \sin\frac{\pi n}{l} r$$ разлагают в ряд Фурье

решение: $$C(r,t) = \sum_{n=1}^{\infty} \left[\int_0^t e^{-\left(\frac{\pi n}{l}\right)^2 D(t-\tau)} f_n(\tau) d\tau \right] \sin\frac{\pi n}{l} r.$$

Решение неоднородной задачи через функцию источника

$$C(r,t)=\int_0^t\int_0^l G(r,\xi,t-\tau)\,f(\xi,\tau)\,d\xi\,d\tau$$

$$G(r,\xi,t-\tau)=\frac{2}{l}\sum_{n=1}^{\infty}e^{-\left(\frac{\pi n}{l}\right)^2 D(t-\tau)}\sin\frac{\pi n}{l}r\cdot\sin\frac{\pi n}{l}\xi$$

В случае неоднородного уравнения (14.1) функция $f(r, t)$ задает распределение источников вещества, действующих постоянно. Поэтому в выражении для $C(r, t)$, через функцию источника необходимо суммировать действие мгновенных точечных источников во все моменты времени от $t = 0$ до рассматриваемого момента t (интеграл по τ) и во всех точках одномерного реактора (интеграл по ξ).

Общее решение краевой задачи

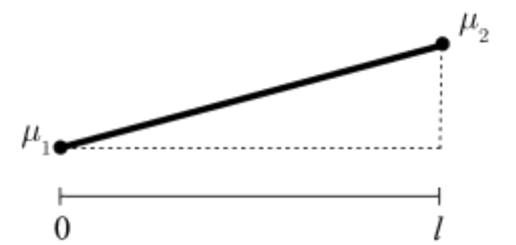
$$C_t = DC_{rr} + f(r, t)$$

$$C(r,0) = \varphi(r)$$

$$C(0, t) = \mu_1(t); \quad C(l, t) = \mu_2(t)$$

$$C(r, t) = V(r, t) + v(r, t).$$

$$V(r,t) = \mu_1(t) + \frac{r}{l}\left[\mu_2(t) - \mu_1(t)\right]$$



$$v_t = Dv_{rr} + \overline{f}(r,t)$$

$$\overline{f}(r,t) = f(r,t) - \left[V_t - DV_{rr}\right]$$

Начальные условия: $v(r,0) = \overline{\varphi}(r)$ $\quad \overline{\varphi}(r) = \varphi(r) - V(r,0)$

Граничные условия – нулевые: $\overline{\mu}_1(t) = 0 \quad \overline{\mu}_2(t) = 0$

Классические работы

- А.Н. Колмогоров, И.Г. Петровский, Н.С. Пискунов “Исследование уравнения диффузии, соединенной с возрастанием вещества, и его применение к одной биологической проблеме” (Бюллетень МГУ, Серия А, Математика и механика, 1937, т.1; Вопросы кибернетики, вып.12, М.,1975, стр.3-30
- Аллан Тьюринг. Химические основы морфогенеза. 1952

A.Turing. The chemical basis of morphogenesis. Phyl. Trans. Roy. Soc. (London) v.237, p. 37-72