Математическое моделирование динамических процессов I

Дисциплина для студентов специальности
«Компьютерная математика и системный анализ»

доц. Лаврова О.А.

механико-математический факультет, БГУ, Минск

2023

Тема 6. Методы моделирования, приводящие к дифференциальным уравнения с частными производными (*продолжение*)

Содержание Темы 6 (продолжение)

1. Процесс диффузии
2. **Уравнение диффузии**
3. Пространственные модели популяционной динамики
4. Качественный анализ модели Фишера-Колмогорова
5. Модель выброса химического вещества промышленным предприятием

Процесс диффузии

Если в среде (газ, жидкость) находится некоторое вещество, то возникает процесс переноса частиц этого вещества в среде из областей с более высокой концентрацией в области с меньшей концентрацией.

Выравнивание концентрации вещества за счет изменения каждого из объемов смеси (среда + вещество) за счет молекулярного движения среды называется **диффузией**.

Неоднородная смесь в замкнутом объеме благодаря процессу диффузии со временем становится однородной.

Диффузия частиц вещества

Рассмотрим процесс диффузии частиц вещества в трубе при отсутствии скорости потока в среде

Концептуальная постановка задачи

- В цилиндрической трубе, заполненной средой, с площадью поперечного сечения S движется *большое количество частиц вещества*. Ось Ox направляем вдоль оси цилиндра
- Полагаем, что S существенно меньше длины трубы, т.е. *труба узкая*. Следовательно **концентрация вещества** φ зависит от значений переменных x и t, т.е. процесс диффузии является одномерным $\varphi = \varphi(x, t)$
- Полагаем, что скорость потока отсутствует, т.е. *среда*, в которой движутся частицы, *однородная*
- Полагаем, что источники вещества отсутствуют и диффузия частиц вещества через стенки трубы не происходит
- Необходимо найти распределение **концентрации вещества** $\varphi(x, t)$ в трубе

Закон сохранения массы вещества

Для построения математической модели процесса диффузии воспользуемся **законом сохранения массы вещества**:

масса вещества любого объема неизменна во времени

Рассмотрим *малый объем трубы* от x до $x + dx$ и рассчитаем изменение массы частиц вещества в *малый период времени* с t до $t + dt$

Закон сохранения массы вещества можно сформулировать так:

<*масса на входе за* dt> - <*масса на выходе за* dt> = <*масса в объеме Sdx*>

$$\boldsymbol{m_{in} - m_{out} = m_V}$$

Плотность диффузионного потока

Согласно **закону Фика** (1855 г.) или **закону Нернста** плотность диффузионного потока вещества $J(x,t)$ вычисляется по формуле

$$J(x,t) = u(x,t)\rho(x,t) = -D(x)\frac{\partial \varphi}{\partial x}(x,t)$$

Знак ‘$-$’ означает, что частицы движутся в сторону уменьшения вещества

$D(x)$ – **коэффициент диффузии** является мерой того, насколько эффективно частицы вещества движутся из области с высокой концентрацией в область с низкой концентрацией

Например, в крови коэффициент диффузии молекул гемоглобина составляет $10^{-7} \text{см}^2/c$, тогда как для кислорода $10^{-5} \text{см}^2/c$

Закон сохранения массы вещества II

$$m_{in} = -D(x)\frac{\partial \varphi}{\partial x}(x, t+\xi dt)\, S\, dt, \qquad 0 \le \xi \le 1$$

среднее значение на входе за период $(t, t+dt)$

$$m_{out} = -D(x+dx)\frac{\partial \varphi}{\partial x}(x+dx, t+\bar{\xi} dt)\, S\, dt, \qquad 0 \le \bar{\xi} \le 1$$

среднее значение на выходе за период $(t, t+dt)$

$$m_v = \left(\varphi(x+\eta dx, t+dt) - \varphi(x+\bar{\eta} dx, t)\right) S\, dx, \qquad 0 \le \eta, \bar{\eta} \le 1$$

Подставляем выражения в закон сохранения массы

$$\frac{-D(x)\frac{\partial \varphi}{\partial x}(x, t+\xi dt) + D(x+dx)\frac{\partial \varphi}{\partial x}(x+dx, t+\bar{\xi} dt)}{dx} = \frac{\varphi(x+\eta dx, t+dt) - \varphi(x+\bar{\eta} dx, t)}{dt}$$

времени

Закон сохранения массы вещества III

$$\frac{-D(x)\frac{\partial\varphi}{\partial x}(x, t+\xi dt) + D(x+dx)\frac{\partial\varphi}{\partial x}(x+dx, t+\xi dt)}{dx} = \frac{\varphi(x+\eta dx, t+dt) - \varphi(x+\eta dx, t)}{dt}$$

Это уравнение баланса массы на участке $[x, x+dx]$ за промежуток времени $[t, t+dt]$. Переходим к пределу при $dx \to 0$ и $dt \to 0$.

$$\frac{\partial\varphi}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\left(D(x)\frac{\partial\varphi}{\partial x}\right) \qquad (*)$$

Содержание Темы 6 (продолжение)

1. Процесс диффузии
2. **Уравнение диффузии**
3. Пространственные модели популяционной динамики
4. Качественный анализ модели Фишера-Колмогорова
5. Модель выброса химического вещества промышленным предприятием

Уравнение диффузии

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x}\left(D(x)\frac{\partial \varphi}{\partial x}(x,t)\right) = 0 \qquad (1)$$

это одномерное **уравнение диффузии** в неподвижной среде.

Уравнение (1) – линейное однородное уравнение в частных производных 2-го порядка параболического типа.

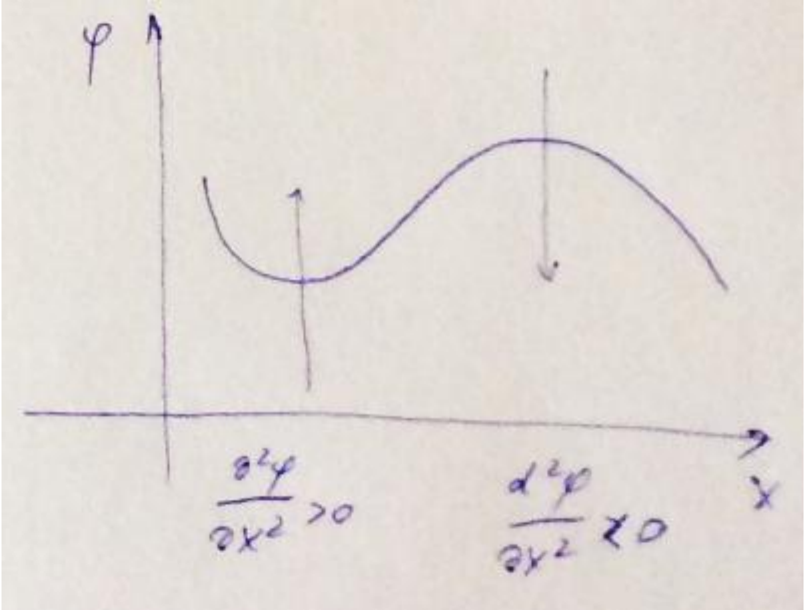
Дополнительно к уравнению диффузии (1) необходимо сформулировать начальное и граничное условие.

Структурно уравнение диффузии (1) аналогично **уравнению теплопроводности** в твердых телах, где φ соответствует температуре тела.

Геометрическая интерпретация уравнения

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} - D\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} = 0$$

Если при $t = t_0$ в некоторой точке $\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} > 0$, следовательно $\varphi(x, t_0)$ – выпуклая функция по переменной x. Тогда $\frac{\partial \varphi}{\partial t} > 0$, следовательно φ будет увеличиваться со временем.



Если при $t = t_0$ в некоторой точке $\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} < 0$, следовательно $\varphi(x, t_0)$ – вогнутая функция по переменной x. Тогда $\frac{\partial \varphi}{\partial t} < 0$, следовательно φ будет уменьшаться со временем. Т.о. при $t \to \infty$ $\varphi(x, t_0) \to const$

Уравнение диффузии II

В общем случае, когда $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$ уравнение диффузии принимает вид

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} - div\big(D(\boldsymbol{x})grad(\varphi)\big) + r(\varphi) = f(\boldsymbol{x}, t)$$

где

$r(\varphi)$ характеризует реакцию вещества со средой. Например, $r(\varphi) = \sigma\varphi, \sigma = const > 0$ описывает оседание частиц вещества. При наличии в уравнении слагаемого $r(\varphi)$ оно называется **уравнением реакции-диффузии**.

$f(\boldsymbol{x}, t)$ – плотность внешних источников вещества

Если $D = const$, то $div\big(Dgrad(\varphi)\big) = D\left(\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2}\right) = D\Delta\varphi$

Уравнение диффузии III

$$\frac{\partial\varphi}{\partial t} - div\big(D(x)grad(\varphi)\big) + r(\varphi) = f(\boldsymbol{x}, t)$$

В случае, если среда движется с заданной скоростью $\boldsymbol{u} = \boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}, t)$, тогда уравнение диффузии принимает вид

$$\frac{\partial\varphi}{\partial t} + div(\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x}, t)\varphi) - div\big(D(\boldsymbol{x})grad(\varphi)\big) + r(\varphi) = f(\boldsymbol{x}, t)$$

В этом случае уравнение называют **уравнением конвективной диффузии**

Содержание Темы 6 (продолжение)

1. Процесс диффузии
2. **Уравнение диффузии**
3. Пространственные модели популяционной динамики
4. Качественный анализ модели Фишера-Колмогорова
5. Модель выброса химического вещества промышленным предприятием

Пространственные модели популяционной динамики I

Диффузионные модели применяются в качестве основы для математического моделирования ***пространственного распределения особей некоторой популяции***, например, заселения особей на новые территории.

В рамках диффузионных моделей полагается, что особи *перемещаются случайно* по аналогии с перемещением частиц некоторого вещества в среде.

Пространственные модели популяционной динамики II

Рассмотрим две модели одномерной популяционной динамики

Модель Скеллама (Skellam)

$$\frac{\partial u}{\partial t} - D\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = ku$$

Модель Фишера-Колмогорова (1937 г.) является фундаментальной в биологии

$$\frac{\partial u}{\partial t} - D\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = ku(1-u)$$

где $u(x,t)$ – плотность особей популяции. Это **уравнения реакции-диффузии**

$D = const > 0$ – характеризует эффективность передвижения особей

$k = const > 0$, слагаемые ku и $ku(1-u)$ регулируют численность популяции

В приведенных моделях конкурируют два механизма: выравнивание популяции за счет процесса диффузии и изменение численности популяции за счет механизмов рождаемости/смертности или др.

Содержание Темы 6 (продолжение)

1. Процесс диффузии
2. **Уравнение диффузии**
3. Пространственные модели популяционной динамики
4. Качественный анализ модели Фишера-Колмогорова
5. Модель выброса химического вещества промышленным предприятием

Анализ модели Фишера-Колмогорова I

Рассмотрим популяционную динамику на основе **модели Фишера-Колмогорова** в ограниченной области проживания $x \in I = [0, l]$.

Цель исследования: на основании качественного анализа математической модели необходимо **оценить размер области проживания** популяции ($|I| = l$), чтобы популяция не вымирала с течением времени.

Анализ модели строится на основании следующего утверждения: *если нулевое решение устойчиво, то популяция будет вымирать при численности популяции в окрестности нулевого значения.*

Задача: необходимо найти условие, при котором нулевое решение является неустойчивым.

Анализ модели Фишера-Колмогорова II

$$\frac{\partial u}{\partial t} - D\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = ku(1-u)$$

Положение равновесия относится к решениям *стационарной модели*

$$u'' = -\frac{k}{D}u(1-u)$$

Уравнение соответствует нелинейной динамической системе 2-го порядка

$$\frac{d\boldsymbol{s}}{dx} = A(\boldsymbol{s})\boldsymbol{s}, \quad \text{где } A = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -\frac{k}{D}(1-u) & 0 \end{pmatrix}, \ \ \boldsymbol{s} = (u, v).$$

Динамическая система имеет два положения равновесия $(0,0)$ и $(1,0)$

Анализ модели Фишера-Колмогорова III

Исследуем на устойчивость положение равновесия $(0{,}0)$.

Линеаризуем динамическую систему в окрестности точки $(0{,}0)$

$$\frac{d\boldsymbol{s}}{dx} = A\boldsymbol{s}, \quad \text{где } A = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -\frac{k}{D} & 0 \end{pmatrix}, \boldsymbol{s} = (u, v).$$

$$\det(A - \lambda I) = \det\begin{pmatrix} -\lambda & 1 \\ -\dfrac{k}{D} & -\lambda \end{pmatrix} = \lambda^2 + \frac{k}{D} = 0 \quad \Longrightarrow \ \lambda_{1,2} = \pm i\frac{k}{D}.$$

Так как $Re\ \lambda_i = \ 0$, то метод линеаризации применять нельзя. Положение равновесия $(0{,}0)$ может быть центром (всегда устойчивый) или фокусом (устойчивый или неустойчивый)

Анализ модели Фишера-Колмогорова IV

Линеаризуем динамическую систему в окрестности положения равновесия $(1{,}0)$. Для этого предварительно сделаем замену переменных $\tilde{u} = u - 1$.

$$\frac{d\boldsymbol{s}}{dx} = A(\boldsymbol{s})\boldsymbol{s}, \quad \text{где } A = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ \frac{k}{D}(1+\tilde{u}) & 0 \end{pmatrix}, \boldsymbol{s} = (\tilde{u}, v).$$

Линеаризация:

$$\frac{d\boldsymbol{s}}{dx} = A\boldsymbol{s}, \qquad \text{где } A = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ \frac{k}{D} & 0 \end{pmatrix}$$

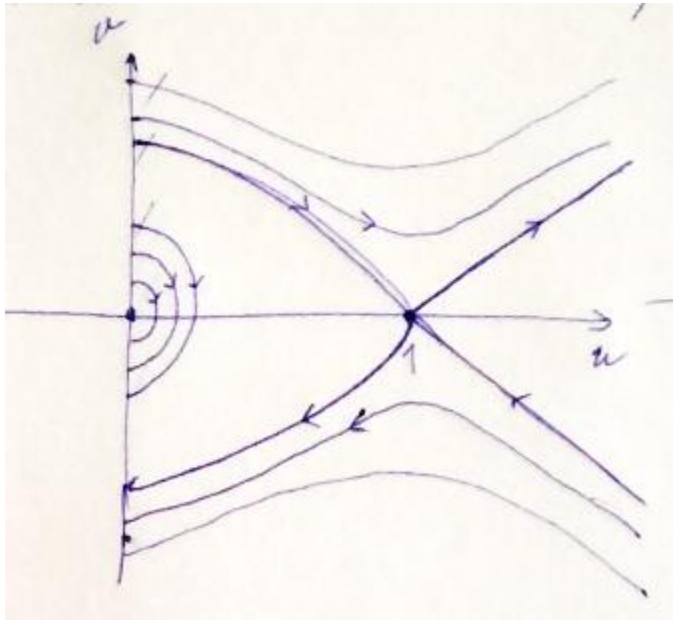
$$\det(A - \lambda I) = \det\begin{pmatrix} -\lambda & 1 \\ \frac{k}{D} & -\lambda \end{pmatrix} = \lambda^2 - \frac{k}{D} = 0 \quad \Longrightarrow \lambda_{1,2} = \pm\sqrt{\frac{k}{D}}.$$

Положение равновесие $(1{,}0)$ является седлом (неустойчивое)

Анализ модели Фишера-Колмогорова V

Построим *фазовый портрет* изучаемой динамической системы.

Для рассматриваемой модели биологически возможными являются решения, для которых $u \geq 0$



Анализ модели Фишера-Колмогорова VI

Для дальнейшего качественного анализа модели необходимо рассмотреть граничные условия.

Для моделирования ситуации *проживания на острове*, когда проживание на границе области полагается невозможным, используются однородные условия Дирихле

$$u(0) = u(l) = 0.$$

В окрестности положения равновесия $(0,0)$ стационарная модели принимает вид $u'' = -\frac{k}{D}u$. Это уравнение модели пружинного осциллятора, общее решение которого может быть записано как

$$u(x) = A \sin\left(\sqrt{\frac{k}{D}}x + \varphi\right)$$

Анализ модели Фишера-Колмогорова VII

$$u(x) = A\sin\left(\sqrt{\frac{k}{D}}x + \varphi\right)$$

Так как $u(0) = 0$, следовательно $\varphi = 0$.

Так как $u(l) = 0$, следовательно $A\sin\left(\sqrt{\frac{k}{D}}l\right) = 0 \Rightarrow \sqrt{\frac{k}{D}}l = \pi \Rightarrow l^* = \pi\sqrt{\frac{D}{k}}$.

Имеем, что при $l = l^*$ построено ненулевое стационарное решение.

Выводы:

- при $l < l^*$ не существует нетривиального стационарного решения, удовлетворяющего условиям $u(0) = u(l) = 0$. Следовательно нулевое решение устойчивое и популяция вымирает
- при $l = l^*$ решение модели стремится к стационарному решению вида $u(x) = A\sin\left(\frac{\pi}{l}x\right)$
- При $l \geq l^*$ популяция, проживающая на острове, не вымирает

Содержание Темы 6 (продолжение)

1. Процесс диффузии
2. **Уравнение диффузии**
3. Пространственные модели популяционной динамики
4. Качественный анализ модели Фишера-Колмогорова
5. Модель выброса химического вещества промышленным предприятием

Модель выброса вещества I

Процесс выброса химического вещества (аэрозоля) промышленным предприятием может быть описан с помощью одномерного стационарного уравнения диффузии

$$-D\frac{d^2\varphi}{dx^2} + \sigma\varphi = Q\delta(x - x_0) \qquad (2)$$

в бесконечной среде $x \in \mathbb{R}$ в поле точечного источника вещества интенсивности $Q = const > 0$, расположенного в точке $x = x_0$, где происходит выброс химического вещества в воздух.

Полагаем ограниченность решения в области определения, т.е.

$$\varphi \to 0 \quad \text{при } x \to \pm\infty$$

Данная модель является простейшим описанием процесса выброса вещества промышленным предприятием.

Модель выброса вещества II

$$-D\frac{d^2\varphi}{dx^2} + \sigma\varphi = Q\delta(x - x_0) \qquad (2)$$

Приведем уравнение (2) к эквивалентной форме без использования δ-функции. Для этого проинтегрируем уравнение (2) на отрезке $\left[x_0 - \frac{\varepsilon}{2}, x_0 + \frac{\varepsilon}{2}\right]$

$$-D\int_{x_0-\frac{\varepsilon}{2}}^{x_0+\frac{\varepsilon}{2}} \frac{d^2\varphi}{dx^2}\,dx + \sigma\int_{x_0-\frac{\varepsilon}{2}}^{x_0+\frac{\varepsilon}{2}} \varphi\,dx = Q\int_{x_0-\frac{\varepsilon}{2}}^{x_0+\frac{\varepsilon}{2}} \delta(x - x_0)\,dx$$

$$-D\left.\frac{d\varphi}{dx}\right|_{x_0-\frac{\varepsilon}{2}}^{x_0+\frac{\varepsilon}{2}} + \sigma\int_{x_0-\frac{\varepsilon}{2}}^{x_0+\frac{\varepsilon}{2}} \varphi\,dx = Q.$$

Перейдем к пределу при $\varepsilon \to 0$, получаем условие вида

$$-D\left.\frac{d\varphi}{dx}\right|_{x_0+0} + D\left.\frac{d\varphi}{dx}\right|_{x_0-0} = Q.$$

Модель выброса вещества III

Рассмотрим область $(-\infty, x_0)$ и обозначим решение в этой области $\varphi_-(x)$.

Рассмотрим область $(x_0, +\infty)$ и обозначим решение в этой области $\varphi_+(x)$.

Тогда математическую модель можно сформулировать в следующем виде

$$\begin{cases} -D\dfrac{d^2\varphi_-}{dx^2} + \sigma\varphi_- = 0, & x \in (-\infty, x_0) \\ -D\dfrac{d^2\varphi_+}{dx^2} + \sigma\varphi_+ = 0, & x \in (x_0, +\infty) \\ \varphi_- \to 0 & x \to -\infty \\ \varphi_+ \to 0 & x \to +\infty \\ -D\left.\dfrac{d\varphi}{dx}\right|_{x_0+0} + D\left.\dfrac{d\varphi}{dx}\right|_{x_0-0} = Q & x = x_0 \\ \varphi_- = \varphi_+ & x = x_0 \end{cases}$$

Модель выброса вещества IV

$$
\begin{cases}
-D\dfrac{d^2\varphi_-}{dx^2} + \sigma\varphi_- = 0, & x \in (-\infty, x_0) \\
-D\dfrac{d^2\varphi_+}{dx^2} + \sigma\varphi_+ = 0, & x \in (x_0, +\infty\ ) \\
\varphi_- \to 0 & x \to -\infty \\
\varphi_+ \to 0 & x \to +\infty \\
-D\left.\dfrac{d\varphi}{dx}\right|_{x_0+0} + D\left.\dfrac{d\varphi}{dx}\right|_{x_0-0} = Q & x = x_0 \\
\varphi_- = \varphi_+ & x = x_0
\end{cases}
$$

$D\lambda^2 - \sigma\lambda = 0 \ \Rightarrow \lambda = \pm\sqrt{\sigma/D} \Rightarrow \ \varphi_- = c_1 e^{-\sqrt{\sigma/D}x} + c_2 e^{\sqrt{\sigma/D}x}$

Так как $\varphi_- \to 0$ при $x \to -\infty \Rightarrow \ c_1 = 0 \ \Rightarrow \varphi_- = c_2 e^{\sqrt{\sigma/D}x}$

Аналогичными рассуждениями получаем, что $\varphi_+ = c_1 e^{-\sqrt{\sigma/D}x}$

Модель выброса вещества V

Скорректируем вид функций: $\varphi_- = c_2 e^{\sqrt{\sigma/D}(x-x_0)}$, $\varphi_+ = c_1 e^{-\sqrt{\sigma/D}(x-x_0)}$

Из условий при $x = x_0$: $-D\left.\frac{d\varphi}{dx}\right|_{x_0+0} + D\left.\frac{d\varphi}{dx}\right|_{x_0-0} = Q, \varphi_- = \varphi_+$ имеем, что

$$\begin{cases} Dc_1\sqrt{\sigma/D} + Dc_2\sqrt{\sigma/D} = Q \\ c_1 = c_2 \end{cases} \Rightarrow c_1 = c_2 = \frac{Q}{2\sqrt{\sigma D}}.$$

Аналитическое решение математической модели имеет вид

$$\varphi(x) = \begin{cases} \frac{Q}{2\sqrt{\sigma D}} e^{\sqrt{\sigma/D}(x-x_0)} & x \le x_0 \\ \frac{Q}{2\sqrt{\sigma D}} e^{-\sqrt{\sigma/D}(x-x_0)} & x \ge x_0 \end{cases}$$

Модель выброса вещества VI

Предположим, что скорость потока воздушных масс отлична от нуля $u = const \neq 0$, тогда математическая модель выброса химического вещества примет вид

$$-D\frac{d^2\varphi}{dx^2} + \sigma\varphi + u\frac{d\varphi}{dx} = Q\delta(x - x_0) \quad x \in \mathbb{R}$$

$$\varphi \to 0 \quad \text{при } x \to \pm\infty$$

Для построения аналитического решения осуществляется переход к уравнениям для функции $\varphi_-(x)$ в области $(-\infty, x_0)$ и для функции $\varphi_+(x)$ в области $(x_0, +\infty)$, связанных условиями при $x = x_0$:

$$-D\left.\frac{d\varphi}{dx}\right|_{x_0+0} + D\left.\frac{d\varphi}{dx}\right|_{x_0-0} = Q, \varphi_- = \varphi_+$$