Modele niejednorodne przestrzennie

1 Gradient

Dla funkcji wielu zmiennych f gradient jest wektorem, którego współrzędnymi są pochodne cząstkowe funkcji f np: dla $f = f(x, y, z)$

$$\nabla f = \left(\frac{\partial f}{\partial x}, \frac{\partial f}{\partial y}, \frac{\partial f}{\partial z}\right)$$

Gradient ma następujące własności:

- wartość ∇f $|\nabla f|$ określa lokalną stromość funkcji f
- kierunek wektora ∇f
  $$u = \frac{\nabla f}{|\nabla f|}$$
  określa kierunek najszybszego wzrostu funkcji f
- wektor ∇f jest prostopadły do izopowierzchni funkcji f
- w ekstremach lokalnych funkcji f gradient zeruje się

Przykład Rozważmy pole wektorowe:

$$F = (M(x, y), N(x, y)) = (2x + 2y + y\cos xy, 2x + x\cos xy)$$

chcielibyśmy sprawdzić czy pole to może opisywć jakiś gradient. tzn, czy istnieje takie f że:

$$F = \nabla f$$

Jeśli tak to

$$F = (M, N) = \left(\frac{\partial f}{\partial x}, \frac{\partial f}{\partial y}\right)$$

gdzie $M = \frac{\partial f}{\partial x}$ i $N = \frac{\partial f}{\partial y}$ w takim razie

$$\frac{\partial M}{\partial y} = f_{xy} = f_{yx} = \frac{\partial N}{\partial x}$$

Sprawdźmy czy to się zgadza ... Teraz spróbujmy znaleźć f, wiemy, że

$$\frac{\partial f}{\partial x} = 2x + 2y + y\cos xy \tag{1}$$
$$\frac{\partial f}{\partial y} = 2x + x\cos xy \tag{2}$$

Całkujemy każde z równań względem jednej zmiennej trzymając drugą zmienną jako stałą

$$f(x,y) = \int_{y=const} (2x + 2y + y\cos xy)dx = x^2 + 2xy + \sin xy + H \tag{3}$$
$$f(x,y) = \int_{x=const} (2x + x\cos xy)dy = 2xy + \sin xy + G \tag{4}$$

tutaj H i G są funkcjami względem tych zmiennych, które w całkowaniu były ustalone.

$$H = h(y) \quad G = g(x)$$

żeby się zgadzało musimy wziąść

$$H = c \quad G = x^2 + c$$

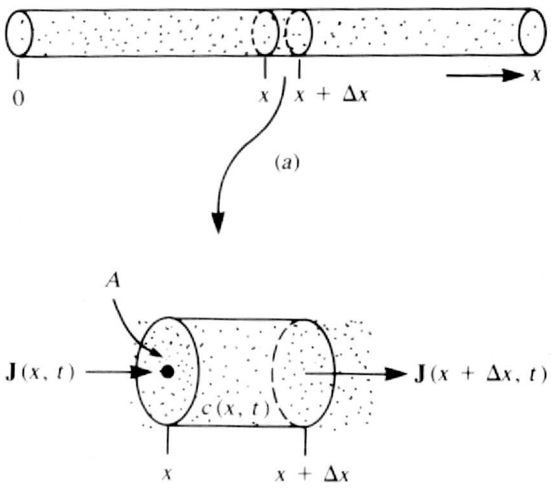
tak więc

$$f(x,y) = x^2 + 2xy + \sin xy + c$$

Bez warunku brzegowego f możemy określić tylko z dokładnością do stałej c

2 Równania zachowania

Wiele własności układów przestrzennie rozległych można wyrazić przez prawa zachowania. Na początek rozważmy prosty jednowymiarowy przypadek. Wyobraźmy sobie rurkę o stałym przekroju.



$$\begin{pmatrix}\text{szybkość zmiany}\\ \text{ilości cząstek}\\ \text{w przedziale}\\ (x, x+\Delta x)\\ \text{w jednostce czasu}\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\text{szybkość}\\ \text{napływu}\\ \text{cząstek}\\ \text{do przedziału}\\ (x, x+\Delta x)\\ \text{w jednostce}\\ \text{czasu}\end{pmatrix} - \begin{pmatrix}\text{szybkość}\\ \text{wypływu}\\ \text{cząstek}\\ \text{z przedziału}\\ (x, x+\Delta x)\\ \text{w jednostce}\\ \text{czasu}\end{pmatrix} \pm \begin{pmatrix}\text{szybkość}\\ \text{powstawania}\\ \text{lub znikania}\\ \text{cząsek w}\\ \text{jednostce czasu}\end{pmatrix}$$

zdefiniujmy następujące pojęcia:

- $c(x,t)$ stężenie cząstek (ilość cząstek na objętość) w punkcie (x,t)
- $\mathbf{J}(x,t)$ strumień cząstek (ilość cząstek przenikających przez jednostkową powierzchnię w kierunku dodatnim osi x w jednostce czasu) w punkcie (x,t)
- $\sigma(x,t)$ ilość cząstek wytworzonych lub unicestwionych w jednostce czasu w punkcie (x,t)
- A pole przekroju poprzecznego rurki
- ΔV objętość elementu rurki $(x, x+\Delta x)$ $\Delta V = A\Delta x$

Wyrażając ostatnie równanie w tych pojęciach otrzymujemy:

$$\frac{\partial}{\partial t}[c(x,t)A\Delta x] = \mathbf{J}(x,t)A - \mathbf{J}(x+\Delta x,t)A \pm \sigma(x,t)A\Delta x$$

dzielimy je przez $A\Delta x$

$$\frac{\partial c(x,t)}{\partial t} = \frac{\mathbf{J}(x,t) - \mathbf{J}(x+\Delta x,t)}{\Delta x} \pm \sigma(x,t)$$

przechodząc z $\Delta x \to 0$

$$\frac{\partial c(x,t)}{\partial t} = -\frac{\partial \mathbf{J}(x,t)}{\partial x} \pm \sigma(x,t)$$

W przypadku trójwymiarowym równanie wygląda analogicznie:

$$\frac{\partial c(x,y,z,t)}{\partial t} = -\left(\frac{\partial \mathbf{J}(x,y,z,t)}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{J}(x,y,z,t)}{\partial y} + \frac{\partial \mathbf{J}(x,y,z,t)}{\partial z}\right) \pm \sigma(x,y,z,t)$$

w notacji wektorowej:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{J} \pm \sigma$$

(dla przypomnienia: wyrażenie $\nabla \cdot \mathbf{J}$ to dywergencja wektora $\mathbf{J}$)

3 Często występujące postacie prawa zachowania

Konkretna postać prawa zachowania wynika z postaci sił, które powodują ruch cząstek oraz zjawisk prowadzących do ich powstawania lub znikania. Poniżej rozważymy trzy bardzo często występujące postacie prawa zachowania.

3.1 Konwekcja

Jeśli jakaś ciecz porusza się makroskopowo to jej cząstki mają średnią prędkość taką jak ciecz $\mathbf{v}(x,y,z,t)$ Strumień cząstek $\mathbf{J} = c\mathbf{v}$ gdzie $c(x,y,z,t)$ jest koncentracją cząstek. Wynika stąd, że

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\nabla \cdot (c\mathbf{v})$$

3.2 Przyciąganie i odpychanie

Jeśli cząstki znajdują się w jakimś polu potencjalnym ψ, z którym oddziałują (np. pole elektrostatyczne dla cząstek naładowanych) to będą poruszały się w kieurnku gradientu pola:

$$\mathbf{J} = c\alpha\nabla\psi$$

co prowadzi do równania:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\nabla \cdot (c\alpha\nabla\psi)$$

3.3 Dyfuzja

Dyfuzja jest efektem stochastycznych ruchów pojedynczych cząstek. Jeśli w przestrzeni występuje niejednorodna koncentracja cząstek to efektywnie więcej cząstek wypływa z obszarów o lokalnie większym stężeniu niż do tych obszarów wpływa. W przybliżeniu liniowym fakt ten ujmuje *prawo Fick'a*:

$$\mathbf{J} = -D\nabla c$$

D jest współczynnikiem dyfuzji (może być niejednorodny przestrzennie). W ogólności otrzymujemy:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \nabla \cdot (D\nabla c)$$

W szczególnym przypadku gdy D jest stałe otrzymujemy:

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

Z rozważań nad wymiarami współczynnika dyfuzji $odlego^2/czas$ wynika kilka ciekawych faktów:

- średnia odległość pokonywana przez cząstki na skutek dyfuzji w jednostce czasu jest proporcjonalna do $\sqrt{Dt}$
- średni czas potrzebny na przedyfundowanie na odlełość d jest $\sim d^2/D$

Przykładowo dla tlenu w wodzie $D \approx 10^{-5} cm^2/s$, Przedyfundowanie przez komórkę o średnicy $\sim 10^{-4}$ cm trwa $\sim 10^{-3}$ s, ale już dyfuzja na odległość 1mm trwałaby $\sim 10^3$ s

4 Rozwiązywanie prostych równań cząstkowych

Rozważamy równanie

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

Poszukujemy rozwiązań postaci

$$c(x,t) = c_T(x,t) + \bar{c}(x)$$

gdzie $c_T(x,t)$ — jest rozwiązaniem przejściowym, zaś $\bar{c}(x)$ jest rozwiązaniem stacjonarnym

1. Zakładamy, że $c_T(x,t) = S(x)T(t)$ i podstawiamy do równania
2. Rozdzielamy zmienne i otrzymujemy równania różniczkowe zwyczajne
3. Patrzymy jaki jest znak stałej separacji K i widzimy jakie funkcje własne S i T mamy: $K > 0 \Rightarrow \exp$ $K < 0 \Rightarrow \sin lub \cos$
4. dobieramy wartości własne λ funkcji własnych S_λ i T_λ tak aby były spełnione warunki brzegowe
5. Zapisujemy $c_T(x,t)$ jako kombinację liniową (być może nieskończoną) czynników $S_\lambda T_\lambda$
6. z warunków początkowych znajdujemy współczyniki w kombinacji liniowej znajdujemy rozwiązanie stacjonarne $\bar{c}(x)$

5 Przykłady i zadania

5.1 Zadanie

Znaleźć rozwiązanie równania

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

dla warunków:
brzegowych:$c(0,t) = c(L,t) = 0$
i początkowych :$c(x,0) = f(x)$

Przykład w matlabie `heat_transp_pde.m`

5.2 Przykład: Propagacja potencjału w aksonie

Spróbujmy zastosować nasze prawo zachowania do gęstości ładunków w aksonie $q(x,t)$ gdzie x położenie wzdłuż aksonu. Przypomnijmy:

$$\frac{\partial q}{\partial t} = -\frac{\partial \mathbf{J}}{\partial x} + \sigma$$

u nas $\mathbf{J}(x,t)$ — prąd wzdłuż aksonu, σ — prędkość z jaką ładunki pojawiają się w aksonie.

Błona aksonu działa jak kondensator więc:

$$q(x,t) = 2\pi r C v(x,t)$$

gdzie C— pojemność błony, r—promień aksonu, $v(x,t)$ — napięcie w poprzek błony.

Następny element to σ:

$$\sigma(x,t) = -2\pi r I_i$$

I_i — prąd jonowy wnikający do aksonu

Prąd **J** znajdujemy z prawa Ohma:

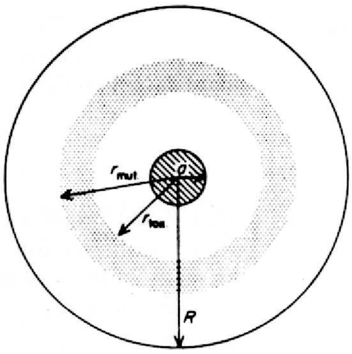
$$\mathbf{J} = -\left(\frac{\pi r^2}{R}\frac{\partial v}{\partial x}\right)$$

R — oporność wewnątrzkomórkowa w kierunku osiowym.

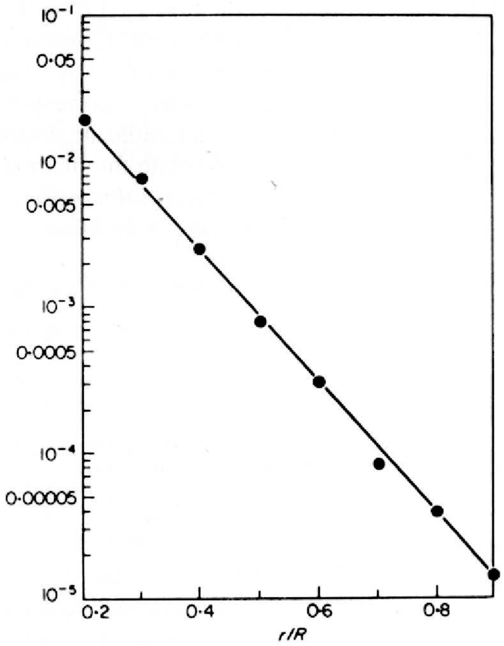
Zbierając wszystkie powyższe wyrazy i przekształcając równanie uzyskujemy:

$$\frac{\partial v}{\partial t} = \frac{r}{2RC}\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} - \frac{I_i}{C}$$

5.3 Przykład: badanie mutagenności



(a)



Chcemy sprawdzić czy pewna substancja chemiczna może wywoływać mutacje u pewnego gatunku bakterii. Mutagenność tej substancji może zależeć od jej stężenia. Wymyślono bardzo elegancki sposób wyznaczania stężenia krytycznego wykorzystującego dyfuzję. Bakterie hoduje się na pożywce na okrągłej szalce. Na środku szalki umieszcza się okrągłą bibułkę nasączoną jednorodnie badaną substancją. Z bibułki tej na drodze dyfuzji substancja rozprzestrzenia się po całej szalce. Problem ma symetrię kołową więc wygodnie jest rozpatrywać go we współrzędnych biegunowych. Równanie dyfuzji:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D\left(\frac{\partial^2 c}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial c}{\partial r}\right) - \frac{c}{\tau}$$

gdzie r — odległość od centrum szalki $c(r,t)$ — stężenie substancji D — współczynnik dyfuzji $1/\tau$ — szybkość spontanicznego zaniku substancji

Prawdopodobieństwo mutacji jest proporcjonalne do stężenia mutagenu oraz do czasu ekspozycji. Aby w rozważaniach pozbyć się zależności od czasu zdefiniowano stężenie scałkowane po czasie:

$$C(r) = \frac{1}{(T_2 - T_1)s} \int_{T_1}^{T_2} c(r,t)dt$$

gdzie: s grubość pożywki T_1 i T_2 są to dopowiednio czas po którym dotarła i po którym przeszła fala dyfuzji

Warunki brzegowe to: w chwili początkowej substancja znajdowała się tylko na bibułce

$$c(r,0) = \begin{cases} c_0 & \mathit{dla}\ r < a \\ 0 & \mathit{dla}\ r \geqslant a \end{cases}$$

oraz na brzegach szalki nie ma przepływu substancji:

$$\left.\frac{\partial c}{\partial r}\right|_{r=R} = 0$$

Równanie dyfuzji można rozwiązać i scałkować otrzymując wyrażenie na $C(R)$

Np. dla bakterii *Salmonella typhimurium* i substancji N-metylo-N-nitro-N^1-nitrozoguanidyny otrzymano następujące dane: $a = 0.318$ cm — śrenica bibułki
$R = 2.5$ cm — średnica szalki
$s = 0.356$ cm — grubość pożywki
$\tau = 2.25$ h — tempo rozpadu substancji
$D = 7.2 \cdot 10^{-6}$ cm^2/s
$c_0/s = 221.04$ μg/cm^3 — początkowe stężenie substancji

W tych warunkach pierścień zmutowanych bakterii wystąpił w odległości 2.17cm.

Zadanie to rozwiążemy posługując się solverem równań cząstkowych w matlabie `pdepe`

5.4 Zadanie

Rozważmy wzrost populacji P ze stałym tempem wzrostu α, która rozprzestrzenia się analogicznie do cząstek dyfundującej substancji. Sytację taką można opisać równaniem:

$$\frac{\partial P}{\partial t} = D\nabla^2 P + \alpha P$$

Dalej rozważać będziemy dla uproszczenia przypadek jednowymiarowy: Sprawdzić, że rozwiązaniem jednowymiarowego równania jest

$$P(x,t) = \frac{P_0}{2\sqrt{\pi D t}} exp\left(\alpha t - \frac{x^2}{4Dt}\right)$$

dla warunków początkowych $P(0,0) = P_0$ i $P(x \neq 0, 0) = 0$

Znaleźć stosunek x/t dla punktów o stałej liczebności tzn $P(x,t) = const = \tilde{P}$. Znajdź wartość tego wyrażenia dla $t \to \infty$

5.5 Zadanie

Rozważmy wzrost dwóch konkurujących populacji u_1 i u_2 ze stałym tempem wzrostu i ograniczoną pojemnością środowiska, która rozprzestrzenia si e w jednym wymiarze analogicznie do cząstek dyfundującej substancji. Sytację taką można opisać równaniem:

$$\frac{\partial u_1}{\partial t} = \nabla^2 u_1 + u_1(1 - u_1 - u_2) \tag{5}$$

$$\frac{\partial u_2}{\partial t} = \nabla^2 u_2 + u_2(1 - u_1 - u_2) \tag{6}$$

Znale zć rozwiązania numeryczne. Przestrzeń ma rozmiary [0 1] i osobniki nie mogą wydostać się poza ten obszar. Rozważyć różne początkowe zagęszczenie osobników.