6 Uždavinys

Arnas Vaicekauskas

2024 m. rugsėjo 27 d.

1 Matematinis modelis

1.1 Bedimensis modelis

$$\frac{\partial c_1}{\partial t} = -3c_1c_2 + D\Delta c_1 \tag{1a}$$
$$\frac{\partial c_2}{\partial t} = -5c_1c_2 + D\Delta c_2 \tag{1b}$$
$$\frac{\partial c_3}{\partial t} = 2c_1c_2 \tag{1c}$$

kur c_1, c_2, c_3 yra bedimensė medžiagų koncentracija, Δ - Laplaso operatorius, t - laikas, D - bedimensis medžiagų c_1 ir c_2 difuzijos koeficientas.

1.2 Elementų maišymasis dviejose dimensijose

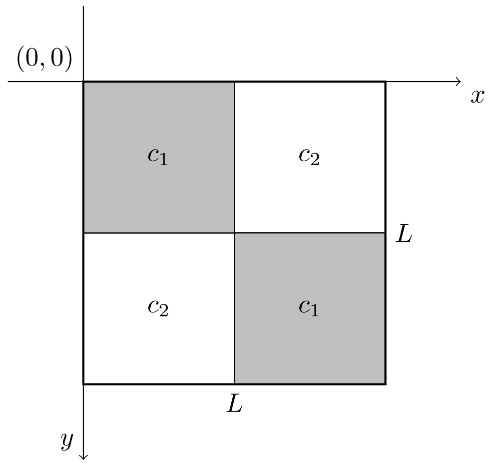
Interpretavus bedimensį modelį (1) dviejose dimensijose gauname lygtis

$$\frac{\partial c_1}{\partial t} = -3c_1c_2 + D\left(\frac{\partial^2 c_1}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c_1}{\partial y^2}\right) \tag{2a}$$
$$\frac{\partial c_2}{\partial t} = -5c_1c_2 + D\left(\frac{\partial^2 c_2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c_2}{\partial y^2}\right) \tag{2b}$$
$$\frac{\partial c_3}{\partial t} = 2c_1c_2 \tag{2c}$$

Šiam modeliui yra taikomos šios pradinės ir kraštinės sąlygos:

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial c_1}{\partial x}\Big|_{x=0} = \frac{\partial c_1}{\partial x}\Big|_{x=L} = \frac{\partial c_2}{\partial x}\Big|_{x=0} = \frac{\partial c_2}{\partial x}\Big|_{x=L} = 0, && y \in [0, L], t \in [0, T]\\
&\frac{\partial c_1}{\partial y}\Big|_{y=0} = \frac{\partial c_1}{\partial y}\Big|_{y=L} = \frac{\partial c_2}{\partial y}\Big|_{y=0} = \frac{\partial c_2}{\partial y}\Big|_{y=L} = 0, && x \in [0, L], t \in [0, T]\\
&c_1(x,y,0) = \begin{cases}1, \text{jei } x \in A\\ 0, \text{kitaip}\end{cases} \quad c_2(x,y,0) = \begin{cases}1, \text{jei } x \notin A\\ 0, \text{kitaip}\end{cases}, && (x,y) \in [0, L]^2, A = \left[0, \tfrac{L}{2}\right]^2 \cup \left[\tfrac{L}{2}, L\right]^2\\
&c_3(x,y,0) = 0, && (x,y) \in [0, L]^2,
\end{aligned}$$

kur L - bedimensis kubo kraštinės ilgis, T - bedimensė proceso trukmė.



1 pav.: Dvimačio modelio pradinės sąlygos laiku $t = 0$. Pilka spalva žymi plotą priklausantį aibei A.

2 Skaitiniai modeliai

Remiantis išreikštiniu baigtinių skirtumų metodu iš dvimačio modelio galima gauti skaitinį modelį.

$$\frac{c_{1,i,j}^{n+1} - c_{1,i,j}^{n}}{\Delta t} = -3c_{1,i,j}^{n} c_{2,i,j}^{n} + D\left(\frac{c_{1,i-1,j}^{n} - 2c_{1,i,j}^{n} + c_{1,i+1,j}^{n}}{(\Delta x)^2} + \frac{c_{1,i,j-1}^{n} - 2c_{1,i,j}^{n} + c_{1,i,j+1}^{n}}{(\Delta y)^2}\right) \tag{3a}$$

$$\frac{c_{2,i,j}^{n+1} - c_{2,i,j}^{n}}{\Delta t} = -5c_{1,i,j}^{n} c_{2,i,j}^{n} + D\left(\frac{c_{2,i-1,j}^{n} - 2c_{2,i,j}^{n} + c_{2,i+1,j}^{n}}{(\Delta x)^2} + \frac{c_{2,i,j-1}^{n} - 2c_{2,i,j}^{n} + c_{2,i,j+1}^{n}}{(\Delta y)^2}\right) \tag{3b}$$

$$\frac{c_{3,i,j}^{n+1} - c_{3,i,j}^{n}}{\Delta t} = 2c_{1,i,j}^{n} c_{2,i,j}^{n}, \tag{3c}$$

kur $n \in [0, T)$ - laiko momentas, $i \in [0, N_L)$ - diskrečios erdvės taško koordinatė x ašyje, $j \in [0, N_L)$ - diskrečios erdvės taško koordinatė y ašyje, $c_{1,i,j}^{n}$ - pirmos medžiagos kiekis diskrečios erdvės taške i, j laiko momentu n, $c_{2,i,j}^{n}$ - antros medžiagos kiekis diskrečios erdvės taške i, j laiko momentu n, $c_{3,i,j}^{n}$ - trečios medžiagos kiekis diskrečios erdvės taške i, j laiko momentu n, Δt - laiko žingsnis, Δx - diskrečios erdvės žingsnis x ašimi, Δy - diskrečios erdvės žingsnis y ašimi.

2.0.1 Laiko žingsnio pasirinkimas

Pertvarkius skaitinio modelio lygtis (3) taip, kad kairėje lygties pusėje liktų medžiagos kiekis sekančiu laiko momentu ir sugrupavus pastovius narius pagal medžiagos kiekio praėjusį laiko momentą gauname išraiška koeficiento, kuris nusako kiek medžiagos ląstelėje i, j persikels į sekantį laiko momentą.

$$c_{1,i,j}^{n+1} = \left(1 - \Delta t\left(3c_{2,i,j}^{n} + 2D\left(\frac{1}{(\Delta x)^2} + \frac{1}{(\Delta y)^2}\right)\right)\right)c_{1,i,j}^{n} + D\Delta t\left(\frac{c_{1,i-1,j}^{n} + c_{1,i+1,j}^{n}}{(\Delta x)^2} + \frac{c_{1,i,j-1}^{n} + c_{1,i,j+1}^{n}}{(\Delta y)^2}\right) \tag{4a}$$

$$c_{2,i,j}^{n+1} = \left(1 - \Delta t\left(5c_{1,i,j}^{n} + 2D\left(\frac{1}{(\Delta x)^2} + \frac{1}{(\Delta y)^2}\right)\right)\right)c_{2,i,j}^{n} + D\Delta t\left(\frac{c_{2,i-1,j}^{n} + c_{2,i+1,j}^{n}}{(\Delta x)^2} + \frac{c_{2,i,j-1}^{n} + c_{2,i,j+1}^{n}}{(\Delta y)^2}\right) \tag{4b}$$

$$c_{3,i,j}^{n+1} = c_{3,i,j}^{n} + 2\Delta t c_{1,i,j}^{n} c_{2,i,j}^{n} \tag{4c}$$

Norint užtikrinti modelio skaitmeninį reikia pasirinkti tokį laiko žingsnį Δt, kad koeficientai būtų neneigiami. Trečioje lygtyje medžiagos kiekio koeficientas nepriklauso nuo laiko žingsnio Δt, todėl turime dvi nelygybes, kurias galime išreikšti per laiko žingsnį Δt.

$$1 - \Delta t\left(3c_{2,i,j}^{n} + 2D\left(\frac{1}{(\Delta x)^2} + \frac{1}{(\Delta y)^2}\right)\right) \geqslant 0 \implies \Delta t \leqslant \frac{1}{3c_{2,i,j}^{n} + 2D\left((\Delta x)^{-2} + (\Delta y)^{-2}\right)}$$

$$1 - \Delta t\left(5c_{1,i,j}^{n} + 2D\left(\frac{1}{(\Delta x)^2} + \frac{1}{(\Delta y)^2}\right)\right) \geqslant 0 \implies \Delta t \leqslant \frac{1}{5c_{1,i,j}^{n} + 2D\left((\Delta x)^{-2} + (\Delta y)^{-2}\right)}$$

Galima panaikinti laiko žingsnio Δt priklausomybę nuo einamojo diskrečios erdvės taško padarius pastebėjimą, kad laiko žingsnis su didžiausiomis medžiagų kiekių $c_{1,i,j}^{n}$ bei $c_{2,i,j}^{n}$ reikšmėmis užtikrintų stabilumą visiem likusiems diskrečios erdvės taškams, taigi:

$$\Delta t \leqslant \min\left(\frac{1}{3\max\limits_{(i,j,n)\in[0,N_L)^2\times[0,T)} c_{2,i,j}^{n} + 2D\left((\Delta x)^{-2} + (\Delta y)^{-2}\right)}, \frac{1}{5\max\limits_{(i,j,n)\in[0,N_L)^2\times[0,T)} c_{1,i,j}^{n} + 2D\left((\Delta x)^{-2} + (\Delta y)^{-2}\right)}\right)$$

Taip pat galime atsikratyti laiko žingsnio Δt priklausomybės nuo einamojo laiko momento, nes pagal duotas kraštines sąlygas į sistemą laikui einant nepatenka joks naujas medžiagų c_1 ir c_2 kiekis. Taip pat vykstant medžiagų c_1 ir c_2 reakcijai, bendri šių medžiagų kiekiai uždaroje sistemoje mažės, todėl:

$$\Delta t \leqslant \min\left(\frac{1}{3\max\limits_{(i,j)\in[0,N_L)^2} c_{2,i,j}^{0} + 2D\left((\Delta x)^{-2} + (\Delta y)^{-2}\right)}, \frac{1}{5\max\limits_{(i,j)\in[0,N_L)^2} c_{1,i,j}^{0} + 2D\left((\Delta x)^{-2} + (\Delta y)^{-2}\right)}\right)$$

Šiuo atveju, iš pradinių sąlygų $\max\limits_{(i,j)\in[0,N_L)^2} c_{2,i,j}^{0} = \max\limits_{(i,j)\in[0,N_L)^2} c_{1,i,j}^{0} = 1$, taigi

$$\Delta t \leqslant \frac{1}{5 + 2D\left((\Delta x)^{-2} + (\Delta y)^{-2}\right)}$$