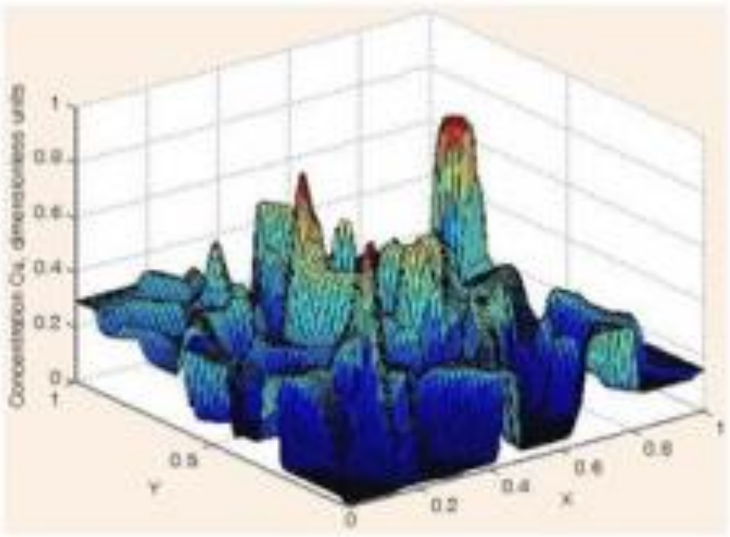


Комп'ютерне моделювання задач прикладної математики

Методи числового розв’язку нелінійних часово-просторових диференціальних рівнянь

Лекція 16

Реакційно-дифузійні рівняння

Канонічна форма

$$\frac{\partial \phi(\mathbf{r},t)}{\partial t} = \nabla \cdot \left[M(\phi) \nabla \frac{\delta F[\phi(\mathbf{r},t)]}{\delta \phi(\mathbf{r},t)} \right] + g(\phi)$$

Функціонал вільної енергії

$$F = \int_V \left[f(\phi) + \frac{1}{2} \kappa (\nabla \phi)^2 \right] dV$$

Реакційно-дифузійне рівняння з мобільністю $M(\phi)$

$$\frac{\partial \phi(\mathbf{r},t)}{\partial t} = g(\phi) + \nabla \cdot \left[M(\phi) \nabla \left\{ \frac{df}{d\phi} - \kappa \nabla^2 \phi \right\} \right]$$

Реакційно-дифузійні рівняння

$$\frac{\partial \phi(\mathbf{r},t)}{\partial t} = g(\phi) + \nabla \cdot \left[M(\phi)\nabla \left\{ \frac{df}{d\phi} - \kappa \nabla^2 \phi \right\} \right]$$

Загальний вигляд

$$\frac{\partial \phi(\mathbf{r},t)}{\partial t} = G\big(\phi(\mathbf{r},t)\big)$$

Дискретне представлення в часі

$$\frac{\phi(r_i,t_{n+1}) - \phi(r_i,t_n)}{\Delta t} = G\big(\phi(r_i,t_n)\big), \qquad \Delta t = t_{n+1} - t_n$$

Інтегрування за часом (метод Ейлера)

$$\phi(r_i,t_{n+1}) = \phi(r_i,t_n) + \Delta t \cdot G\big(\phi(r_i,t_n)\big)$$

Реакційно-дифузійні рівняння

Права частина реакційно-дифузійного рівняння

$$G(\phi) = g(\phi) + \nabla \cdot \left[M(\phi) \nabla \left\{ \frac{df}{d\phi} - \kappa \nabla^2 \phi \right\} \right]$$

Випадок $M = const$:

$$G(\phi) = g(\phi) + M\nabla^2 \frac{df}{d\phi} - M\kappa\nabla^4\phi$$

Різницева схема інтегрування за простором:

- Одновимірний простір

$$\nabla^2\varphi_i = \varphi_{i-1} + \varphi_{i+1} - 2\varphi_i$$

- Двовимірний простір

$$\nabla^2\varphi_{i,j} = \varphi_{i-1,j} + \varphi_{i+1,j} + \varphi_{i,j-1} + \varphi_{i,j+1} - 4\varphi_{i,j}$$

- Тривимірний простір

$$\nabla^2\varphi_{i,j,k} = \varphi_{i-1,j,k} + \varphi_{i+1,j,k} + \varphi_{i,j-1,k} + \varphi_{i,j+1,k} + \varphi_{i,j,k-1} + \varphi_{i,j,k+1} - 6\varphi_{i,j}$$

Похідні вищих порядків: $\nabla^4\varphi(\mathbf{r}) = \nabla^2\big(\nabla^2\varphi(\mathbf{r})\big)$, …

Реакційно-дифузійні рівняння

$$\frac{\partial\phi(\mathbf{r},t)}{\partial t} = g(\phi) + M\nabla^2\frac{df}{d\phi} - M\kappa\nabla^4\phi$$

Розв’язок рівняння:

$$\phi(r_i, t_{n+1}) = \phi(r_i, t_n) + \Delta t \cdot \left[g\big(\phi(r_i, t_n)\big) + M\nabla^2\frac{df}{d\phi} - M\kappa\nabla^4\phi\right]$$

Різницева схема інтегрування за простором:

- Одновимірний простір

$$\nabla^2\varphi_i = \varphi_{i-1} + \varphi_{i+1} - 2\varphi_i$$

- Двовимірний простір

$$\nabla^2\varphi_{i,j} = \varphi_{i-1,j} + \varphi_{i+1,j} + \varphi_{i,j-1} + \varphi_{i,j+1} - 4\varphi_{i,j}$$

- Тривимірний простір

$$\nabla^2\varphi_{i,j,k} = \varphi_{i-1,j,k} + \varphi_{i+1,j,k} + \varphi_{i,j-1,k} + \varphi_{i,j+1,k} + \varphi_{i,j,k-1} + \varphi_{i,j,k+1} - 6\varphi_{i,j}$$

Похідні вищих порядків: $\nabla^4\varphi(\mathbf{r}) = \nabla^2\big(\nabla^2\varphi(\mathbf{r})\big)$, …

Реакційно-дифузійні рівняння

Випадок $M = M(\phi)$:

$$\frac{\partial \phi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = g(\phi) + \nabla \cdot \left[M(\phi) \nabla \underbrace{\left\{ \frac{df}{d\phi} - \kappa \nabla^2 \phi \right\}}_{W(\phi)} \right]$$

Просторова похідна:

$$\nabla \cdot [M(\phi) \nabla W(\phi)] = \frac{\partial}{\partial r}\left[(M) \cdot \left(\frac{\partial}{\partial r} W \right) \right] = \frac{\partial M}{\partial r} \cdot \frac{\partial W}{\partial r} + M \frac{\partial^2 W}{\partial r^2}$$

$$= \cancel{\nabla M \cdot \nabla W} + M \nabla^2 W$$

Приблизне подання (аналог випадку $M = const$):

$$\nabla \cdot [M(\phi) \nabla W(\phi)] \approx M \nabla^2 W$$

Реакційно-дифузійні рівняння

Випадок $M = M(\phi)$:

$$\frac{\partial\phi(\mathbf{r},t)}{\partial t} = g(\phi) + \nabla\cdot\left[M(\phi)\nabla\underbrace{\left\{\frac{df}{d\phi} - \kappa\nabla^2\phi\right\}}_{W(\phi)}\right]$$

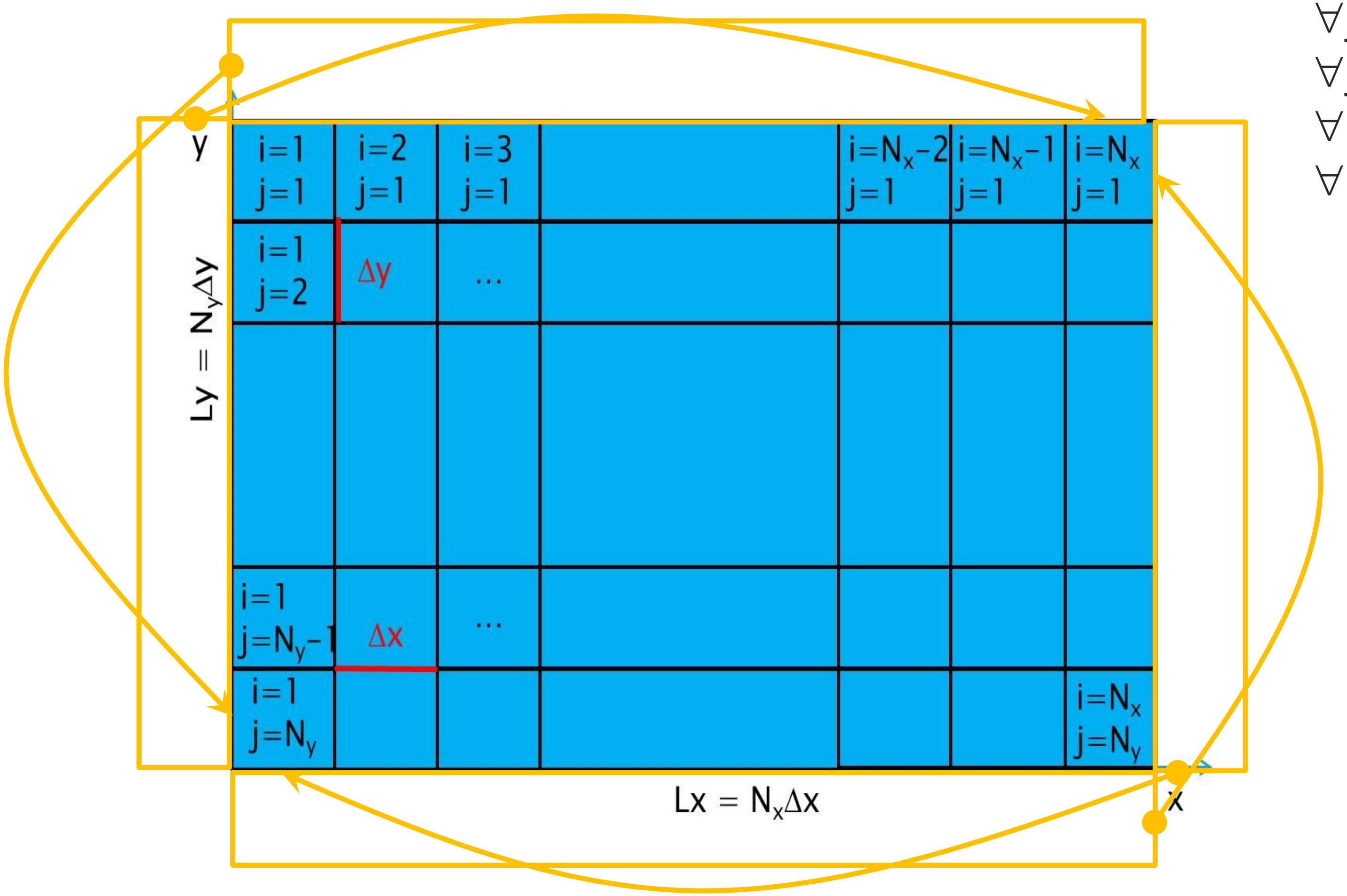
Математично вірний підхід:

$$\nabla\cdot[M\nabla W] = \frac{1}{2}\times$$

$$\begin{aligned}
&\left[\left(M_{i+1,j,k} + M_{i,j,k}\right)\cdot\left(W_{i+1,j,k} - W_{i,j,k}\right) - \left(M_{i,j,k} + M_{i-1,j,k}\right)\cdot\left(W_{i,j,k} - W_{i-1,j,k}\right)\right]/(\Delta x)^2 \\
+&\left[\left(M_{i,j+1,k} + M_{i,j,k}\right)\cdot\left(W_{i,j+1,k} - W_{i,j,k}\right) - \left(M_{i,j,k} + M_{i,j-1,k}\right)\cdot\left(W_{i,j,k} - W_{i,j-1,k}\right)\right]/(\Delta y)^2 \\
+&\left[\left(M_{i,j,k+1} + M_{i,j,k}\right)\cdot\left(W_{i,j,k+1} - W_{i,j,k}\right) - \left(M_{i,j,k} + M_{i,j,k-1}\right)\cdot\left(W_{i,j,k} - W_{i,j,k-1}\right)\right]/(\Delta z)^2
\end{aligned}$$

Реакційно-дифузійні рівняння

Різницева схема інтегрування за простором: контроль граничних умов



Періодичні:

$\forall j$ $T(0,j) = T(N_x,j)$;

$\forall j$ $T(N_x+1,j) = T(1,j)$

$\forall i$ $T(i,0) = T(i,N_y)$

$\forall i$ $T(i,N_y+1) = T(i,1)$

Реакційно-дифузійні рівняння

$$\frac{\partial\phi(\mathbf{r},t)}{\partial t} = g(\phi) + \nabla\cdot\left[M(\phi)\nabla\left\{\frac{df}{d\phi} - \kappa\nabla^2\phi\right\}\right]$$

Спектральний метод Фур'є

$$\phi_k(r) = exp(ikr)$$

$$\nabla\phi_k(r) = \frac{\partial}{\partial r}\phi_k(r) = \frac{\partial}{\partial r}exp(ikr) = ik\ exp(ikr) = ik\ \phi_k(r)$$

Друга похідна

$$\nabla^2\phi_k(r) = -k^2\ \phi_k(r)$$

Четверта похідна

$$\nabla^4\phi_k(r) = k^4\ \phi_k(r)$$

Реакційно-дифузійні рівняння

Випадок $M = const$

$$\frac{\partial \phi(\mathbf{r},t)}{\partial t} = g(\phi) + \left[-Mk^2\left\{\frac{df}{d\phi}\right\}_k - M\kappa k^4\{\phi\}_k\right]_r$$

Випадок $M = M(\phi)$

$$\frac{\partial \phi(\mathbf{r},t)}{\partial t} = g(\phi) + \left[ik\left\{M(\phi)\left[ik\left(\left\{\frac{df}{d\phi}\right\}_k + \kappa k^2\{\phi\}_k\right)\right]_r\right\}_k\right]_r$$

Реакційно-дифузійні рівняння

Генерація *k*-простору

```
int Nx21 = Nx / 2 + 1;
int Ny21 = Ny / 2 + 1;
int Nz21 = Nz / 2 + 1;
int Nx2 = Nx + 1;
int Ny2 = Ny + 1;
int Nz2 = Nz + 1;
double *kx = new double[Nx+2];
double *ky = new double[Ny+2];
double *kz = new double[Nz+2];
double fk1,fk2,fk3;
double delkx = (2.0*M_PI)/(Nx*dx);
double delky = (2.0*M_PI)/(Ny*dy);
double delkz = (2.0*M_PI)/(Nz*dz);
for(int i = 0; i < Nx21; i++)
{
  fk1 = i * delkx;
  kx[i] = fk1;
  kx[Nx2 - i] = -fk1;
}
for(int j = 0; j <  Ny21; j++)
{
  fk2 = j * delky;
  ky[j] = fk2;
  ky[Ny2 - j] = -fk2;
}
for(int k = 0; k < Nz21; k++)
{
  fk3 = k * delkz;
  kz[k] = fk3;
  kz[Nz2 - k] = -fk3;
}
for (int i = 0; i<Nx; i++)
  for (int j = 0; j<Ny; j++)
    for (int k = 0; k<Nz; k++)
      k2[k+Nz*j+Nz*Ny*i] = kx[i]*kx[i] + ky[j]*ky[j] + kz[k]*kz[k];
```

Реакційно-дифузійні рівняння

Випадок $M = const$

$$\frac{\partial\phi(\mathbf{r},t)}{\partial t} = g(\phi) + \left[-Mk^2\left\{\frac{df}{d\phi}\right\}_k - M\kappa k^4\{\phi\}_k\right]_r$$

```
void memory_allocation()
{
  fftw_complex *inp_phi, *out_phi, *inp_df, *out_df, *out_phi_k, *out_phi_r;
  inp_phi = (fftw_complex*)fftw_malloc(sizeof(fftw_complex)*(Nx*Ny));
  inp_df = (fftw_complex*)fftw_malloc(sizeof(fftw_complex)*(Nx*Ny));
  out_phi = (fftw_complex*)fftw_malloc(sizeof(fftw_complex)*(Nx*Ny));
  out_df = (fftw_complex*)fftw_malloc(sizeof(fftw_complex)*(Nx*Ny));
  out_phi_k = (fftw_complex*)fftw_malloc(sizeof(fftw_complex)*(Nx*Ny));
  out_phi_r = (fftw_complex*)fftw_malloc(sizeof(fftw_complex)*(Nx*Ny));

  fftw_plan plan_phi = fftw_plan_dft_2d(Nx, Ny, inp_phi, out_phi, FFTW_FORWARD, FFTW_ESTIMATE);
  fftw_plan plan_df = fftw_plan_dft_2d(Nx, Ny, inp_df, out_df, FFTW_FORWARD, FFTW_ESTIMATE);
  fftw_plan plan_out = fftw_plan_dft_2d(Nx, Ny, out_phi_k, out_phi_r, FFTW_BACKWARD, FFTW_ESTIMATE);
}
```

Реакційно-дифузійні рівняння

Випадок $M = const$

$$\frac{\partial \phi(\mathbf{r},t)}{\partial t} = g(\phi) + \left[-Mk^2 \left\{ \frac{df}{d\phi} \right\}_k - M\kappa k^4 \{\phi\}_k \right]_r$$

```
void FFT(double *inp, double *out)
{
  for (int i = 0; i<Nx*Ny; i++)
  {
    inp_phi[i][0] = inp[i];
    inp_phi[i][1] = 0.0;
    inp_df[i][0] = dF(inp[i]);
    inp_df[i][1] = 0.0;
  }

  fftw_execute(plan_phi);
  fftw_execute(plan_df);

  for (int i = 0; i<Nx*Ny; i++)
  {
    out_phi_k[i][0] = -M*k2[i]*out_df[i][0] - M*kappa*k2[i]*k2[i]*out_phi[i][0];
    out_phi_k[i][1] = -M*k2[i]*out_df[i][1] - M*kappa*k2[i]*k2[i]*out_phi[i][1];
  }

  fftw_execute(plan_out);

  for (int i = 0; i<Nx*Ny; i++)
    out[i] = (1.0/Nx/Ny)*out_phi_r[i][0];
}
```

Реакційно-дифузійні рівняння

Випадок $M = const$

$$\frac{\partial\phi(\mathbf{r},t)}{\partial t} = g(\phi) + \left[-Mk^2\left\{\frac{df}{d\phi}\right\}_k - M\kappa k^4\{\phi\}_k\right]_r$$

```
void memory_erasing()
{
  fftw_free(inp_phi);
  fftw_free(inp_df);
  fftw_free(out_phi);
  fftw_free(out_df);
  fftw_free(out_phi_r);
  fftw_free(out_phi_k);

  fftw_destroy_plan(plan_phi);
  fftw_destroy_plan(plan_df);
  fftw_destroy_plan(plan_out);
}
```

Реакційно-дифузійні рівняння

Випадок $M = M(\phi)$

$$\frac{\partial \phi(\mathbf{r},t)}{\partial t} = g(\phi) + \left[ik \left\{ M(\phi) \left[ik \left(\left\{ \frac{df}{d\phi} \right\}_k + \kappa k^2 \{\phi\}_k \right) \right]_r \right\}_k \right]$$

```
void memory_allocation()
{
  fftw_complex *inp_phi, *out_phi, *inp_df, *out_df, *out_phi_k, *out_phi_r;
  inp_phi = (fftw_complex*)fftw_malloc(sizeof(fftw_complex)*(Nx*Ny));
  inp_df = (fftw_complex*)fftw_malloc(sizeof(fftw_complex)*(Nx*Ny));
  out_phi = (fftw_complex*)fftw_malloc(sizeof(fftw_complex)*(Nx*Ny));
  out_df = (fftw_complex*)fftw_malloc(sizeof(fftw_complex)*(Nx*Ny));
  out_phi_k = (fftw_complex*)fftw_malloc(sizeof(fftw_complex)*(Nx*Ny));
  out_phi_r = (fftw_complex*)fftw_malloc(sizeof(fftw_complex)*(Nx*Ny));

  fftw_plan plan_phi = fftw_plan_dft_2d(Nx, Ny, inp_phi, out_phi, FFTW_FORWARD, FFTW_ESTIMATE);
  fftw_plan plan_df = fftw_plan_dft_2d(Nx, Ny, inp_df, out_df, FFTW_FORWARD, FFTW_ESTIMATE);
  fftw_plan plan_out = fftw_plan_dft_2d(Nx, Ny, out_phi_k, out_phi_r, FFTW_BACKWARD, FFTW_ESTIMATE);

  fftw_complex *fnc1_r, *fnc1_k, *fnc2_r, *fnc2_k;
  fnc1_r = (fftw_complex*)fftw_malloc(sizeof(fftw_complex)*(Nx*Ny));
  fnc1_k = (fftw_complex*)fftw_malloc(sizeof(fftw_complex)*(Nx*Ny));
  fnc2_r = (fftw_complex*)fftw_malloc(sizeof(fftw_complex)*(Nx*Ny));
  fnc2_k = (fftw_complex*)fftw_malloc(sizeof(fftw_complex)*(Nx*Ny));

  fftw_plan plan_k2r = fftw_plan_dft_2d(Nx, Ny, fnc1_k, fnc1_r, FFTW_BACKWARD, FFTW_ESTIMATE);
  fftw_plan plan_r2k = fftw_plan_dft_2d(Nx, Ny, fnc2_r, fnc2_k, FFTW_FORWARD, FFTW_ESTIMATE);
}
```

Реакційно-дифузійні рівняння

Випадок $M = M(\phi)$

$$\frac{\partial \phi(\mathbf{r},t)}{\partial t} = g(\phi) + \left[ik \left\{ M(\phi) \left[ik \left(\left\{ \frac{df}{d\phi} \right\}_k + \kappa k^2 \{\phi\}_k \right) \right]_r \right\}_k \right]_r$$

```
void FFT(double *inp, double *out
{
  for (int i = 0; i<Nx*Ny; i++)
  {
    inp_phi[i][0] = inp[i];
    inp_phi[i][1] = 0.0;
    inp_df[i][0] = dF(inp[i]);
    inp_df[i][1] = 0.0;
  }
  fftw_execute(plan_phi);
  fftw_execute(plan_df);


  fftw_execute(plan_out);
  for (int i = 0; i<Nx*Ny; i++)
    out[i] = (1.0/Nx/Ny)*out_phi_r[i][0];
}
```

```
for (int i = 0; i<Nx*Ny; i++)
{
  fnc1_k[i][0] = - k[i] * (out_df[i][1] + kappa*k[i]*k[i]*out_phi[i][1]);
  fnc1_k[i][1] =   k[i] * (out_df[i][0] + kappa*k[i]*k[i]*out_phi[i][0]);
}
fftw_execute(plan_k2r);
for (int i = 0; i<Nx*Ny; i++)
{
  fnc2_r[i][0] = (1.0/Nx/Ny)*fnc1_r[i][0] * M(inp[i]);
  fnc2_r[i][1] = (1.0/Nx/Ny)*fnc1_r[i][1] * M(inp[i]);
}
fftw_execute(plan_r2k);
for (int i = 0; i<Nx*Ny; i++)
{
  out_phi_k[i][0] = - k[i] * fnc2_k[i][1];
  out_phi_k[i][1] =   k[i] * fnc2_k[i][0];
}
```

Реакційно-дифузійні рівняння

Випадок $M = M(\phi)$

$$\frac{\partial \phi(\mathbf{r},t)}{\partial t} = g(\phi) + \left[ik \left\{ M(\phi) \left[ik \left(\left\{ \frac{df}{d\phi} \right\}_k + \kappa k^2 \{\phi\}_k \right) \right]_r \right\}_k \right]_r$$

```
void memory_erasing()
{
  fftw_free(inp_phi);
  fftw_free(inp_df);
  fftw_free(out_phi);
  fftw_free(out_df);
  fftw_free(out_phi_r);
  fftw_free(out_phi_k);

  fftw_destroy_plan(plan_phi);
  fftw_destroy_plan(plan_df);
  fftw_destroy_plan(plan_out);

  fftw_free(fnc1_r);
  fftw_free(fnc1_k);
  fftw_free(fnc2_r);
  fftw_free(fnc2_k);

  fftw_destroy_plan(plan_k2r);
  fftw_destroy_plan(plan_r2k);
}
```

Дякую за увагу