Ministry of education and science of Republic of Kazakhstan
Kazakh National University named after al-Farabi

Faculty: “Mechanics and Mathematics”
Department: “Mathematical and Computer Modelling”

Report

Done by: Kakibay Aruzhan

$$\begin{cases} \dfrac{\partial s}{\partial t} = g(s,a) + \nabla^2 s \\ \dfrac{\partial a}{\partial t} = f(s,a) + \beta \nabla^2 a \end{cases}$$

$$\nabla = \frac{\partial}{\partial x} i + \frac{\partial}{\partial y} j$$

$$\nabla^2 s = \frac{\partial^2 s}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 s}{\partial y^2}$$

$$\nabla^2 a = \frac{\partial^2 a}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 a}{\partial y^2}$$

$$\begin{cases} g(s,a) = \gamma[s_0 - s - \rho F(s,a)] \\ f(s,a) = \gamma[\alpha(a_0 - a) - \rho F(s,a)] \\ F(s,a) = sa/(1 + s + ks^2) \end{cases}$$

$$\begin{cases} \dfrac{s_{ij}^{n+1} - s_{ij}^{n}}{\Delta t} = g(s,a) + \left(\dfrac{s_{i+1j}^{n} - 2s_{ij}^{n} + s_{i-1j}^{n}}{\Delta x^2} + \dfrac{s_{ij+1}^{n} - 2s_{ij} + s_{ij-1}}{\Delta y^2} \right) \\ \dfrac{a_{ij}^{n+1} - a_{ij}^{n}}{\Delta t} = f(s,a) + \beta \left(\dfrac{a_{i+1j}^{n} - 2a_{ij}^{n} + a_{i-1j}^{n}}{\Delta x^2} + \dfrac{a_{ij+1}^{n} - 2a_{ij}^{n} + a_{ij-1}^{n}}{\Delta y^2} \right) \end{cases}$$

$$s_{ij}^{n+1} = \left(g(s,a) + \left(\frac{s_{i+1j}^{n} - 2s_{ij}^{n} + s_{i-1j}^{n}}{\Delta x^2} + \frac{s_{ij+1}^{n} - 2s_{ij} + s_{ij-1}}{\Delta y^2} \right) \right) \cdot \Delta t + s_{ij}^{n}$$

$$a_{ij}^{n+1} = \left(f(s,a) + \beta \left(\frac{a_{i+1j}^{n} - 2a_{ij}^{n} + a_{i-1j}^{n}}{\Delta x^2} + \frac{a_{ij+1}^{n} - 2a_{ij}^{n} + a_{ij-1}}{\Delta y^2} \right) \right) \cdot \Delta t + a_{ij}^{n}$$

$t=0$:

$$s(x,y,t=0) = 0.$$

$$a(x,y,t=0) = 0$$

Граничные условия:

$$\frac{\partial s}{\partial x} = \frac{\partial a}{\partial x} = 0; \quad x = 0, \quad x = a \text{ для всех } 0 \leqslant y \leqslant b,$$

$$\frac{\partial s}{\partial y} = \frac{\partial a}{\partial y} = 0; \quad y = 0, \quad y = b \text{ для всех } 0 \leqslant x \leqslant a. \tag{6.6}$$

Случай периодических граничных условий рассматривается так же, только вместо (6.6) будем иметь

$$s|_{x=0} = s|_{x=a}, \quad \left.\frac{\partial s}{\partial x}\right|_{x=0} = \left.\frac{\partial s}{\partial x}\right|_{x=a}$$

при всех y и

$$s|_{y=0} = s|_{y=b}, \quad \left.\frac{\partial s}{\partial y}\right|_{y=0} = \left.\frac{\partial s}{\partial y}\right|_{y=l}$$

$$\frac{S_{ij}^{n+1}-S_{ij}^{n}}{\Delta t}=g(s,a)+\left(\frac{S_{i+1j}^{n}-2S_{ij}^{n}+S_{i-1j}^{n}}{\Delta x^2}+\frac{S_{ij+1}^{n}-2S_{ij}^{n}+S_{ij-1}^{n}}{\Delta y^2}\right)$$

$$\frac{e^{a(t+\Delta t)}e^{ikx}e^{iky}-e^{at}e^{ikx}e^{iky}}{\Delta t}=\left(\frac{e^{at}e^{ik(x+\Delta x)}e^{iky}-2e^{at}e^{ikx}e^{iky}+e^{at}e^{ik(x-\Delta x)}e^{iky}}{\Delta x^2}+\right.$$

$$\left.+\frac{e^{at}e^{ikx}e^{ik(y+\Delta y)}-2e^{at}e^{ikx}e^{iky}+e^{at}e^{ikx}e^{ik(y-\Delta y)}}{\Delta y^2}\right)$$

$$\frac{(e^{a\Delta t}-1)\cancel{e^{at}e^{ikx}e^{iky}}}{\Delta t}=\left(\frac{\cancel{e^{at}e^{ik(x)}e^{iky}}(e^{ik\Delta x}-2+e^{-ik\Delta x})}{\Delta x^2}+\frac{\cancel{e^{at}e^{ikx}e^{iky}}(e^{ik\Delta y}-2+e^{-ik\Delta y})}{\Delta y^2}\right)$$

$$e^{a\Delta t}=\left|\left(\frac{e^{ik\Delta x}-2+e^{-ik\Delta x}}{\Delta x^2}+\frac{(e^{ik\Delta y}-2+e^{-ik\Delta y})}{\Delta y^2}\right)\cdot\Delta t+1\right|\le 1.$$

$e^{ik\Delta x}=|\cos k\Delta x+i\sin k\Delta x|$ $\quad e^{ik\Delta y}=|\cos k\Delta y+i\sin k\Delta y|$

$e^{-ik\Delta x}=|\cos k\Delta x-i\sin k\Delta x|$ $\quad e^{-ik\Delta y}=|\cos k\Delta y+i\sin k\Delta y|$

$$\left|\left(\frac{\cos k\Delta x+\cancel{i\sin k\Delta x}-2+\cos k\Delta x-\cancel{i\sin k\Delta x}}{\Delta x^2}+\frac{\cos k\Delta y+\cancel{i\sin k\Delta y}-2+\cos k\Delta y-\cancel{i\sin k\Delta y}}{\Delta y^2}\right)\Delta t+1\right|\le 1$$

$$\left|\left(\frac{(2\cos \overset{-1}{k\Delta x}-2)}{\Delta x^2}+\frac{(2\cos \overset{-1}{k\Delta y}-2)}{\Delta y^2}\right)\Delta t+1\right|\le 1.$$

$$\left|\left(\frac{-4}{\Delta x^2}+\frac{-4}{\Delta y^2}\right)\Delta t+1\right|\le 1.$$

$$-1\le 1-4\Delta t\left(\frac{1}{\Delta x^2}+\frac{1}{\Delta y^2}\right)\le 1.$$

$$-\cancel{2}\le-\cancel{4}\Delta t\left(\frac{1}{\Delta x^2}+\frac{1}{\Delta y^2}\right)$$

$$1\ge 2\Delta t\left(\frac{1}{\Delta x^2}+\frac{1}{\Delta y^2}\right)$$

$$2\Delta t\left(\frac{1^{\Delta y^2}}{\Delta x^2}+\frac{1^{\Delta x^2}}{\Delta y^2}\right)\le 1.$$

$$2\Delta t\left(\frac{\Delta y^2+\Delta x^2}{\Delta x^2\Delta y^2}\right)\le 1.$$

$$\Delta t=\frac{1}{2}\,\frac{\Delta x^2\Delta y^2}{\Delta y^2+\Delta x^2}=$$

$\Delta x=\Delta y.$ $$\left\{\Delta x=\Delta y\right\}=\frac{1}{2}\,\frac{\Delta x^2\cancel{\Delta x^2}}{2\cancel{\Delta x^2}}=\frac{1}{4}\Delta x^2.$$

Параметры:

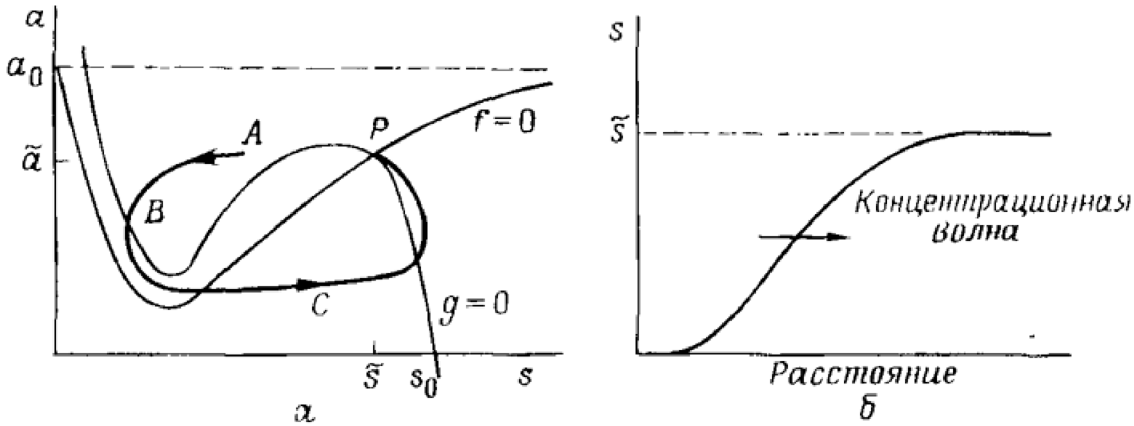


Рис. 6.3. *a* – типичные изоклины скоростей реакций для возбудимого стационарного состояния. Кривая ABCP показывает изменения концентраций после первоначального возмущения, соответствующего точке A. *б* – типичная уединенная волна для механизма (6.2), (6.3) при значениях параметров $\alpha = 0.05$, $K = 1.0$, $\rho = 0.9$, $s_0 = 39$, $a_0 = 784$ (стационарное состояние $\tilde{s} = 22$, $\tilde{a} = 440$), $\gamma = 20$, $\beta = 1$, при которых скорость $c \approx 5.25$.

Программный код:

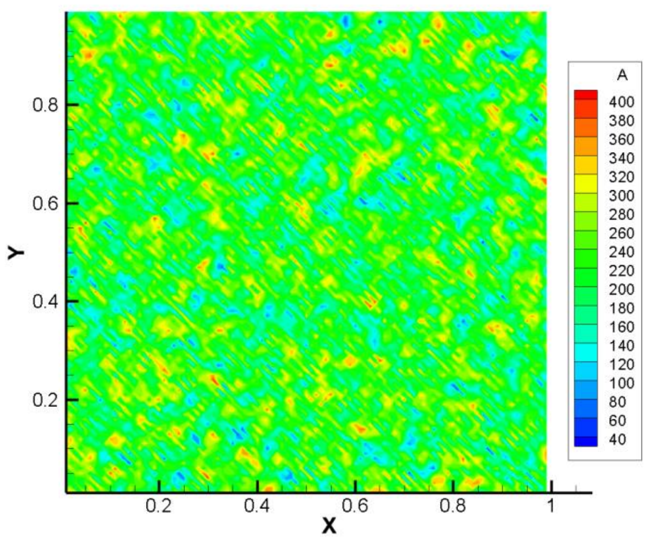
```
#include<iostream>
#include<fstream>
#include<cmath>
#include <ctime>
using namespace std;
int main() {

	const int n = 101;
	int iter = 0;
	double ro = 0.9, K = 1.0, alfa = 0.05, betta = 1.0;
	double dx = 1.0 / (n - 1), dy = 1.0 / (n - 1), dt = dx*dx*0.25, eps = pow(10, -8), dif,
dif2;

	double gamma = 20, s0 = 22, a0 = 440;

	double A[n][n], A0[n][n];

	double S[n][n], S0[n][n];

	double g[n][n], f[n][n], F[n][n];
	srand(time(0));
	for (int i = 0; i < n; i++) {
		for (int j = 0; j < n; j++) {

			A0[i][j] = rand() % 440;
			S0[i][j] = rand() % 22;
```

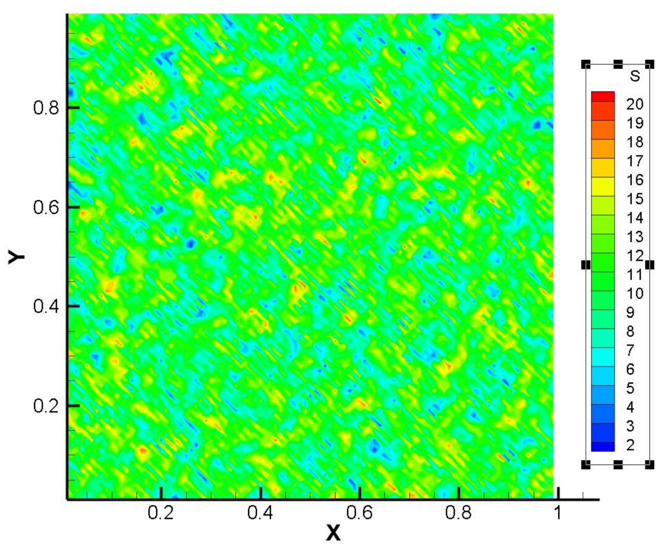
```
		}
	}
	double a = 50.0, s = 80.0;
	for (int i = 0; i < n; i++) {
		for (int j = 0; j < n; j++) {
			F[i][j] = S0[i][j] * A0[i][j] / (1.0 + S0[i][j] + K*S0[i][j] * S0[i][j]);
			g[i][j] = gamma*(s0 - S0[i][j] - ro*F[i][j]);
			f[i][j] = gamma*(alfa*(a0 - A0[i][j]) - ro*F[i][j]);

		}
	}

	do {
		for (int i = 0; i <n; i++) {
			for (int j = 0; j <n; j++) {
				A0[0][j] = A0[1][j];

				A0[n - 1][j] = A0[n-2][j];

				A0[i][n - 1] = A0[i][n-2];

				A0[i][0] = A0[i][1];

				///////////////////////////////

				S0[0][j] = S0[1][j];

				S0[n - 1][j] = S0[n - 2][j];

				S0[i][n - 1] = S0[i][n - 2];

				S0[i][0] = S0[i][1];

			}
		}

		for (int i = 0; i <= n - 1; i++) {
			for (int j = 0; j <= n - 1; j++) {

				S[i][j] = (g[i][j] * (dx*dx) + ((S0[i + 1][j] - 2.0*S0[i][j] + S0[i
 - 1][j])) + ((S0[i][j + 1] - 2.0*S0[i][j] + S0[i][j - 1])))*dt / (dx*dx) + S0[i][j];
				A[i][j] = (f[i][j] * (dx*dx) + betta*(((A0[i + 1][j] - 2.0*A0[i][j]
 + A0[i - 1][j])) + ((A0[i][j + 1] - 2.0*A0[i][j] + A0[i][j - 1]))))*dt / (dx*dx) + A0[i][j];

			}
		}


		for (int i = 0; i < n; i++) {
			for (int j = 0; j < n; j++) {
				A0[i][j] = A[i][j];
				S0[i][j] = S[i][j];


			}
		}
		iter++;

	} while (iter < 100);

	fstream fout("task4.dat", ios::out);
```

```
        fout << "VARIABLES = \"X\",\"Y\",\"A\",\"S\"" << endl;
        fout << "ZONE I=" << n - 2 << ",J=" << n - 2 << ",F=POINT" << endl;
        for (int i = 1; i < n - 1; i++) {
                for (int j = 1; j < n - 1; j++) {
                        fout << i * dx << '\t' << j * dy << '\t' << A0[i][j] << '\t' << S0[i][j] <<
endl;
                }
        }


        cout << "iterations = " << iter << endl;
        system("pause");
        return 0;
}
```

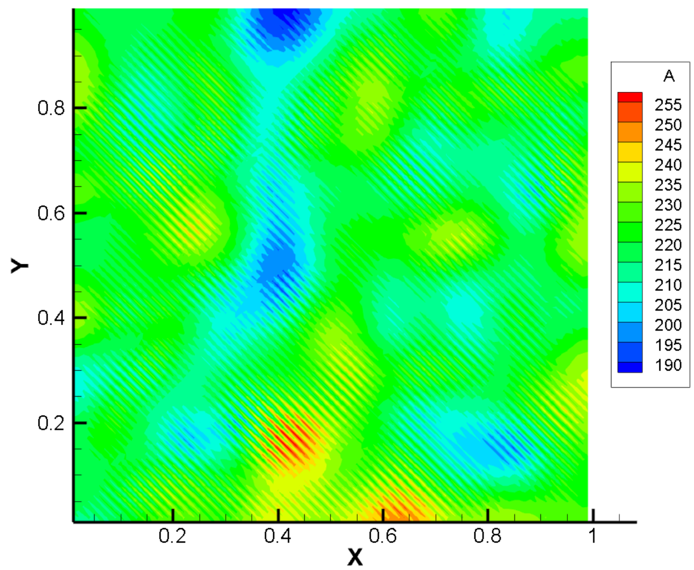
Результаты:

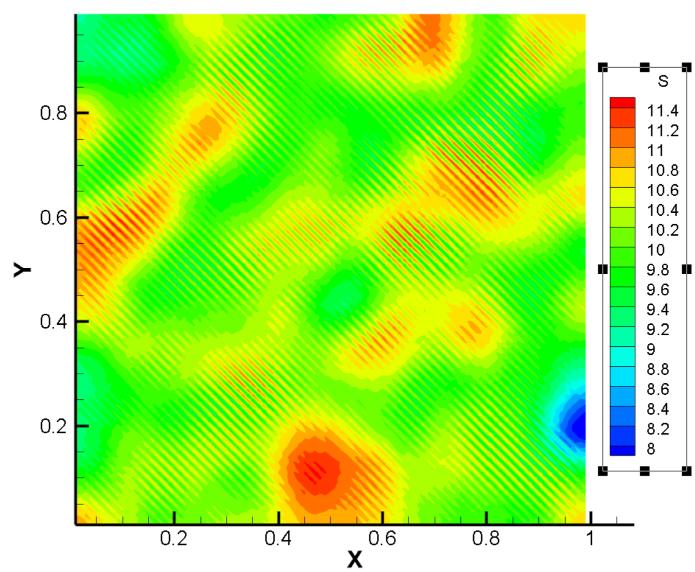
Когда итерация =1



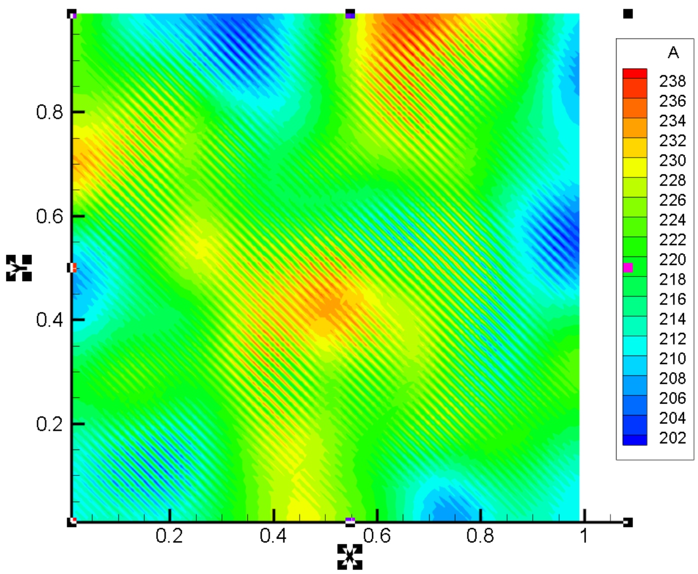


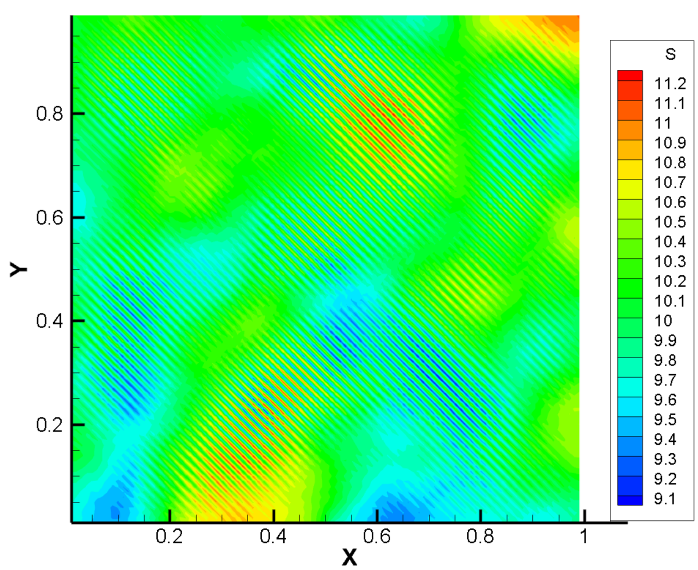
Когда итерация =50





Когда итерация =100





Выводы:

Мы рассмотрели здесь систему, обладающую некоторыми ключевыми свойствами, общими для многих практических механизмов реакций с ингибированием субстратом. Рассмотрели механизм реакции с диффузией с ингибированием субстратом(Томас (1976)). Увеличивая итерацию мы видим что скорость реакций стремительно растет.