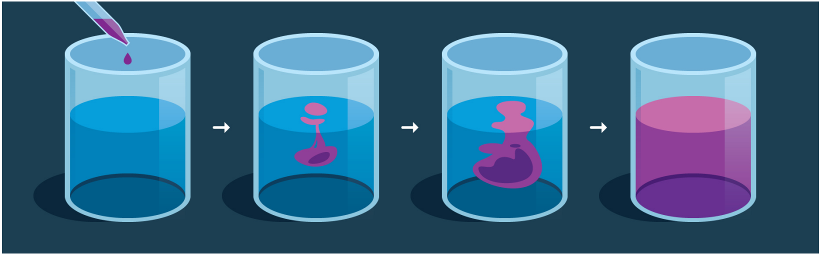
Дифференциальные уравнения в частных производных и клеточные автоматы

Храмов Д. А.

22.01.2019

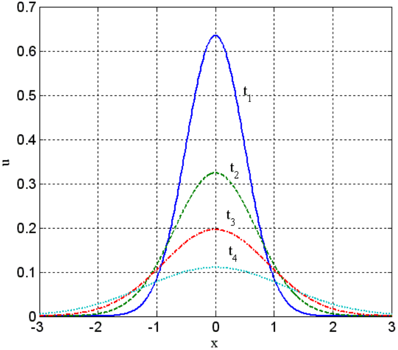
1. Уравнение диффузии

Диффузия



Диффузия — процесс переноса вещества из области с высокой концентрацией в область с низкой концентрацией

Концентрация — количество вещества



$t_1 < t_2 < t_3 < t_3$

Концентрация примеси является функцией места и времени,

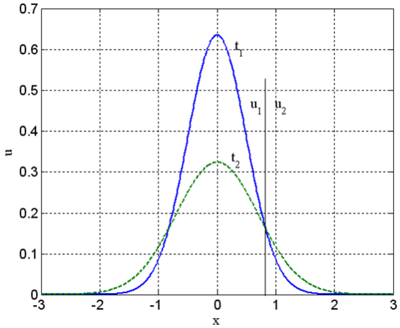
$$u = u(x, t)$$

если

- температура вещества постоянна
- в среде нет особых, энергетически более выгодных областей

Поток

Поток вещества через сечение трубы — количество примеси, проходящее через сечение в единицу времени.



Поток будет тем больше, чем больше перепад концентраций примеси в сечении:

$$\Phi \sim \frac{u(x+\Delta x, t) - u(x,t)}{u(x,t)} \approx -\frac{\partial u}{\partial x}$$

Плотность потока

Поток пропорционален площади сечения S и зависит от свойств вещества D

$$\Phi = -DS\frac{\partial u}{\partial x}$$

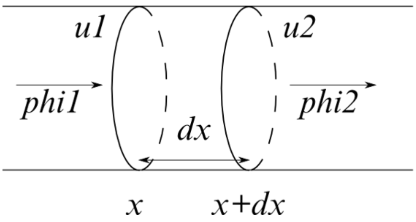
D — коэффициент диффузии. Характеризует диффузионные свойства вещества.

Чтобы избавится от привязки к конкретному сечению, используют понятие **плотности потока вещества —** количества вещества, проходящего в единицу времени через единицу площади сечения

$$\varphi = -D\frac{\partial u}{\partial x}$$

Изменение концентрации со временем

Выделим в трубе элементарный объем и потоки примеси, входящий и выходящий из этого объема.



По закону сохранения материи разность этих потоков равна изменению концентрации внутри данного объема, происходящему с течением времени

$$(u_1 - u_2)S\Delta x = (\varphi_2 - \varphi_1)S\Delta t$$

$$\Delta u \Delta x = -\Delta \varphi \Delta t$$

Уравнение диффузии

$$\Delta u \partial x = -\Delta \varphi \partial t$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -\frac{\partial \varphi}{\partial x}$$

Вспомним определение потока вещества и получим

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\left(D\frac{\partial u}{\partial x}\right)$$

D, вообще говоря, является функцией концентрации, т.к. частота обмена местами атома зависит от структуры окружающего этот атом участка вещества. Но если считать $D \sim const$, то получим **уравнение диффузии**

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} = D\frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2}$$

Краевые условия

Кроме самого уравнения

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} = D\frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2}$$

необходимо задать также

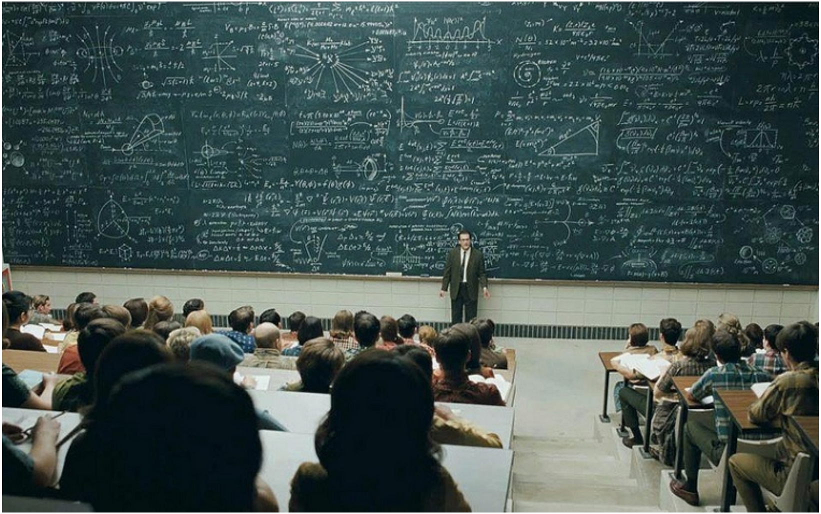
- начальное условие

$$u(x,0) = f(x)$$

- граничные условия

$$u(a,t) = u_a, \quad u(b,t) = u_b$$

Что дальше?



2. Метод конечных разностей

Дискретизация

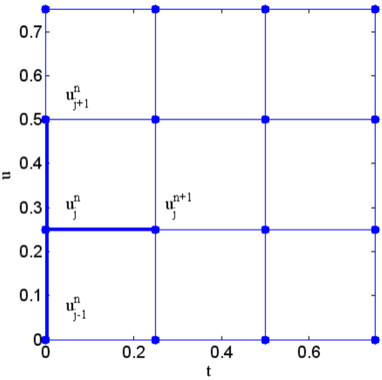
Заменим непрерывную функцию $u(x,t)$ функцией, заданной в дискретные моменты времени

$$0, \Delta t, 2\Delta t, \ldots, N\Delta t = T$$

в дискретных точках пространства

$$a, a+\Delta x, a+2\Delta x, \ldots, a+J\Delta x = b$$

$$u(x,t) \to u(a+j\Delta x, n\Delta t)$$



Продолжим превращения

Заменим в уравнении диффузии производные их приближенными значениями:

$$\frac{\partial u}{\partial t} \approx \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t}$$

$$\frac{\partial u_{j+1}}{\partial x} \approx \frac{u_{j+1}^n - u_j^n}{\Delta x}, \quad \frac{\partial u_j}{\partial x} \approx \frac{u_j^n - u_{j-1}^n}{\Delta x}$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \approx \frac{\frac{\partial u_{j+1}}{\partial x} - \frac{\partial u_j}{\partial x}}{\Delta x} = \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{\Delta x^2}$$

Разностное уравнение

Вместо исходного уравнения

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} = D\frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2}$$

получим

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} = D\frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{\Delta x^2}$$

Если известен профиль концентрации в заданный момент времени, т.е. для определенного момента времени n мы знаем значения все значения u_j^n, то мы можем найти концентрацию в следующий момент времени u_j^{n+1} для каждого j, т.е. для любой точки пространства (сетки) и тем самым решить уравнение.

Расчетная формула

Перепишем

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} = D\frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{\Delta x^2}$$

следующим образом

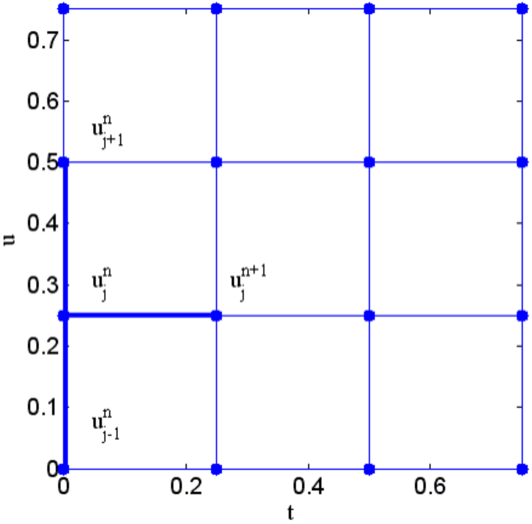
$$u_j^{n+1} = u_j^n + \frac{D\Delta t}{\Delta x^2}(u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n)$$

или

$$u_j^{n+1} = s(u_{j+1}^n + u_{j-1}^n) + (1-2s)u_j^n, \quad s = D\Delta t/\Delta x^2.$$

Т.е. концентрация примеси в данной точке в определенный момент времени определяется концентрацией в этой точке (на $(1-2s)$) и в соседних точках (s) в предыдущий момент времени.

Вспомним сетку



Код

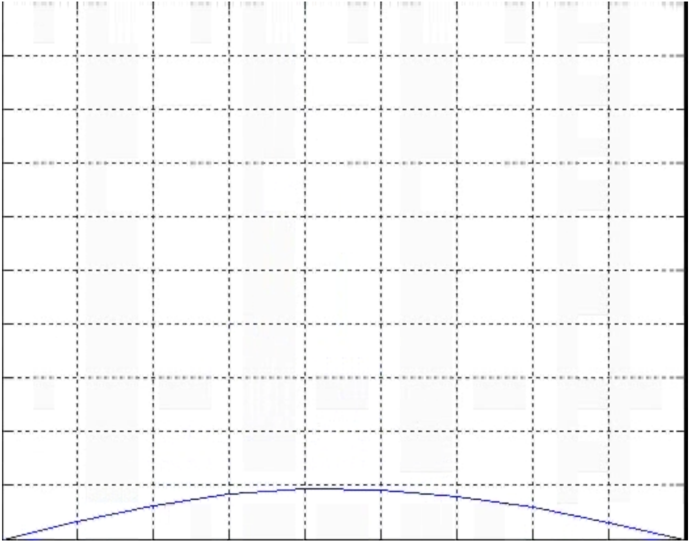
```
xmin = -5; xmax = 5; % границы стержня
tmin = 0; tmax = 4;  % интервал времени
J = 10; % число узлов по x
N = 20; % число узлов по t
dx = (xmax-xmin)/J; % шаг разбиения стержня
dt = (tmax-tmin)/N; % шаг по времени

D = 2; % коэф-т диффузии
fmax = 50; % макс. знач-е концентрации
f = zeros(1,J); f( round(J/2) ) = fmax;
u = zeros(N,J);
u(1,:) = f; % нач. условие
ua = 0; ub = 0; % гран. условия в нач. момент времени

s = D*dt/dx^2;
if 1-2*s < 0, error('s incorrect'), end

for n = 1:N-1
    u(n+1,2:J-1) = s*(u(n,3:J) + u(n,1:J-2)) + (1-2*s)*u(n,2:J-1);
    u(n+1,1) = ua;
    u(n+1,J) = ub;
end
surf(u)
xlabel('x'),ylabel('t'),zlabel('u')
```

Видео



difd1.wmv

Замечания

По физическому смыслу задачи масса распространяющейся примеси должна сохранятся

$$s + s + (1 - 2s) = 1$$

Кроме того, коэффициенты s и $(1 - s)$ должны быть положительны: $s > 0$, $(1 - 2s) > 0$, иначе получится, будто примесь движется «вспять во времени».

Но при $N = 10$ имеем $s = 0.8$ и второе неравенство не выполняется. В программу необходимо добавить проверку.

3. Клеточные автоматы

Клеточный автомат, моделирующий диффузию

Клеточный автомат представляет собой набор конечного числа элементов (клеток или ячеек), образующих регулярную структуру (сетку).

Каждая клетка может находиться в одном из конечного числа состояний, например, «0» или «1».

Для клетки вводится понятие окрестности, т.е. клеток, располагающихся не более чем на заданном расстоянии от нее.

Каждая клетка может взаимодействовать только с клетками из своей окрестности.

0	33,3	33,3	33,3	0

$$u_j^{n+1} = s_l u_{j-1}^n + s u_j^n + s_r u_{j+1}^n$$
$$s_l + s + s_r = 1.$$

Код

```
ncells = 10; % количество Ячеек
N = 20; % количество шагов по времени

L = 1/3; % влево
S = 1/3; % на месте
R = 1/3; % вправо

c = zeros(ncells,1); % Массив значений концентрации
cmax = 100;          % Максимум концентрации
c(ncells/2) = cmax;  % Начальное значение концентрации
x = 2:ncells-1;

axis([1 ncells 0 cmax]), grid on
xlabel('Position'), ylabel('Value')

for i=1:N   % цикл по времени
    line(1:ncells,c,'EraseMode','none') % рисуем текущие значениЯ концентрации
    c(x) = c(x-1)*L + c(x)*S + c(x+1)*R; % считаем новые
    title(['Time Step: ' num2str(i)])
end
```

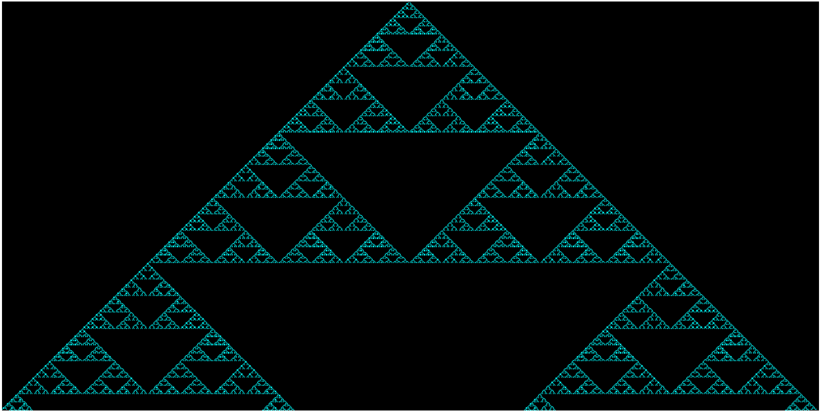
Одномерный клеточный автомат

...	x_{i-2}	x_{i-1}	x_i	x_{i+1}	x_{i+2}	...

Окрестность клетки x_t

Текущее состояние окрестности	111	110	101	100	011	010	001	000
Состояние центральной клетки на следующем шаге	0	1	0	1	1	0	1	0

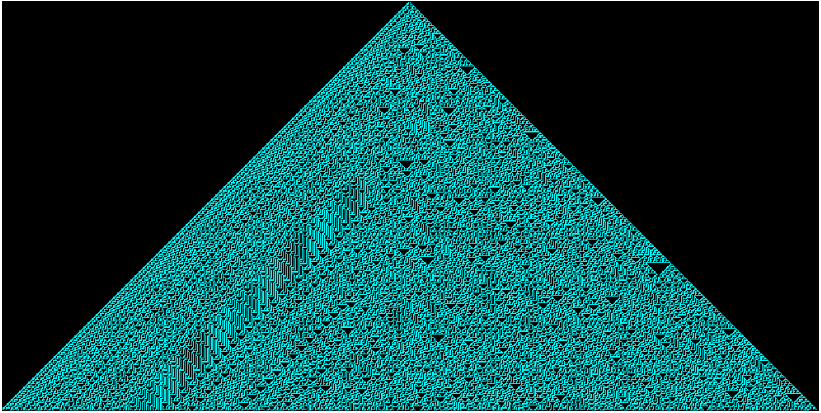
Правила одномерного КА



Правило 30

Текущее состояние окрестности	111	110	101	100	011	010	001	000
Состояние центральной клетки на следующем шаге	0	0	0	1	1	1	1	0

Правило 30 в действии



Игра “Жизнь” (Game of Life)

Место действия — размеченная на клетки плоскость.

Каждая клетка может находиться в двух состояниях: быть “живой” или быть “мертвой” (пустой).

Клетка имеет восемь соседей, окружающих ее.

Игрок задает начальное распределение клеток (первое поколение) и после этого не принимает участия в игре.

Каждое следующее поколение рассчитывается по правилам:

- в пустой клетке, рядом с которой есть ровно три живые клетки, зарождается жизнь;
- если у живой клетки есть две или три живые соседки, то эта клетка продолжает жить; если соседей меньше двух или больше трёх, то клетка умирает (“от одиночества” или “от перенаселённости”).

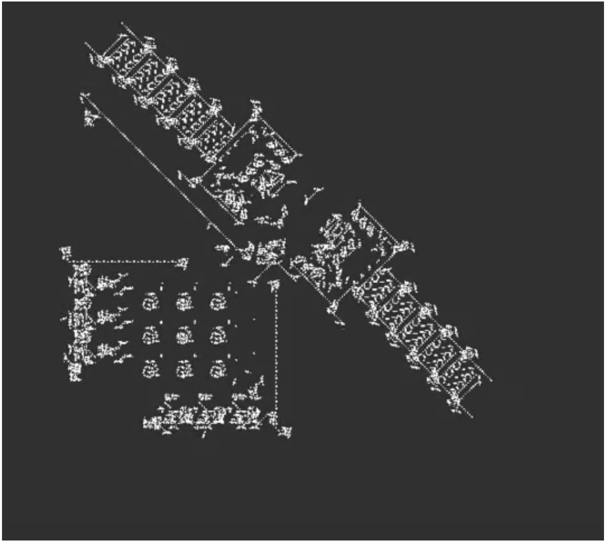
История

Джон Конвей заинтересовался проблемой, предложенной в 1940-х годах Джоном фон Нейманом: можно ли создать гипотетическую машину, которая способна воспроизводить сама себя.

Джону фон Нейману удалось создать математическую модель такой машины с очень сложными правилами.

Конвей попытался упростить эти правила, и, в конце концов, создал правила игры "Жизнь".

Впервые описание этой игры было опубликовано в октябрьском выпуске журнала Scientific American за 1970 год, в рубрике "Математические игры" Мартина Гарднера.



Видео: game of life.wmv

Youtube: epic conway's game of life

Факты и приложения

- **Биология.** Внешнее сходство с развитием популяций примитивных организмов привело к созданию модификаций игры, которые могут с точностью повторять размножение бактерий.
- **Физика.** Клеточные автоматы вообще и игра “Жизнь” в частности используются для анализа “явлений переноса” — диффузии, вязкости и теплопроводности.
- **Информатика.** В игре “Жизнь” можно создать универсальную машину Тьюринга: таким образом все, что может быть вычислено алгоритмически, может быть вычислено внутри игры “Жизнь”.