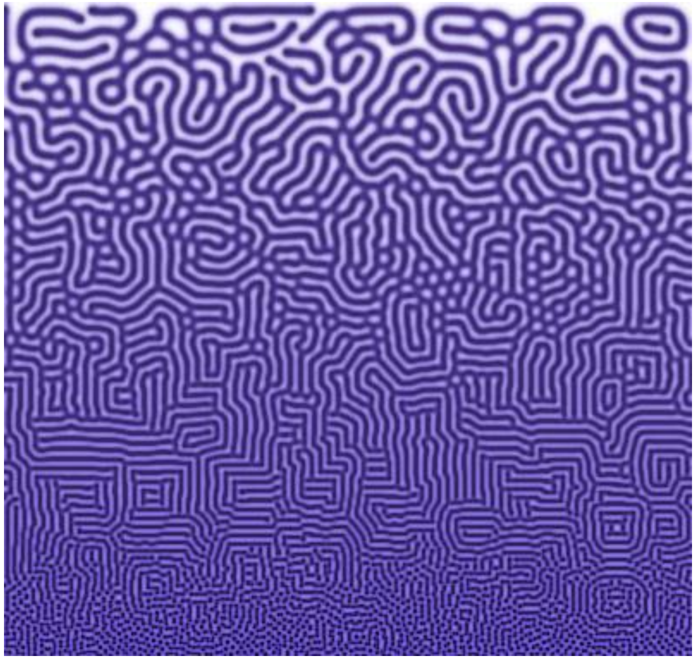
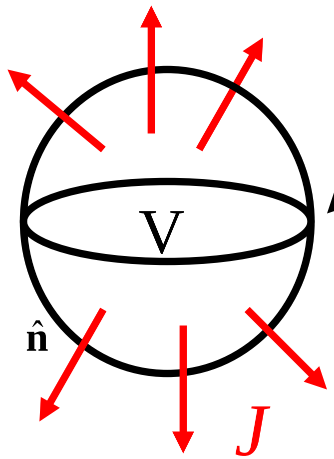
Symulacje komputerowe w fizyce



Ćwiczenia XI – Reakcja Graya-Scotta.

Równanie reakcji-dyfuzji



objętość V

bilans masy:

tyle się rodzi w wyniku reakcji

$$\frac{\partial N}{\partial t} = -\oint_S \vec{J} \cdot \vec{n}\, dS + \int_V f(c)\, dV$$

tyle cząstek opuszcza V przez brzegi

prąd dyfuzyjny:

$$J = -D\nabla c$$

ale $N = \int_V c\, dV$ $\oint_S \vec{J} \cdot \vec{n}\, dS = \int_V \operatorname{div} \vec{J}\, dV$ (prawo Gaussa)

Równanie reakcji-dyfuzji (2)

$$\int_V \frac{\partial c}{\partial t}\, dV = \int_V \text{-div}\,\vec{J}\;dV + \int_V f(c)\;dV$$

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\text{div}\,\vec{J} + f(c) \qquad\qquad J = -D\nabla c$$

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D\nabla^2 c + f(c)$$

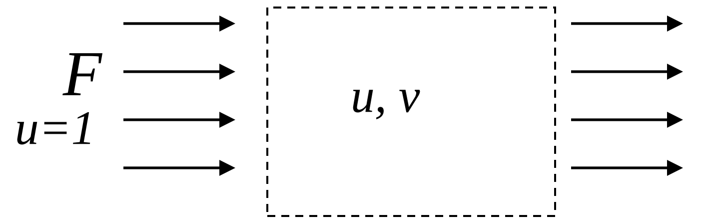
Układ Graya-Scotta

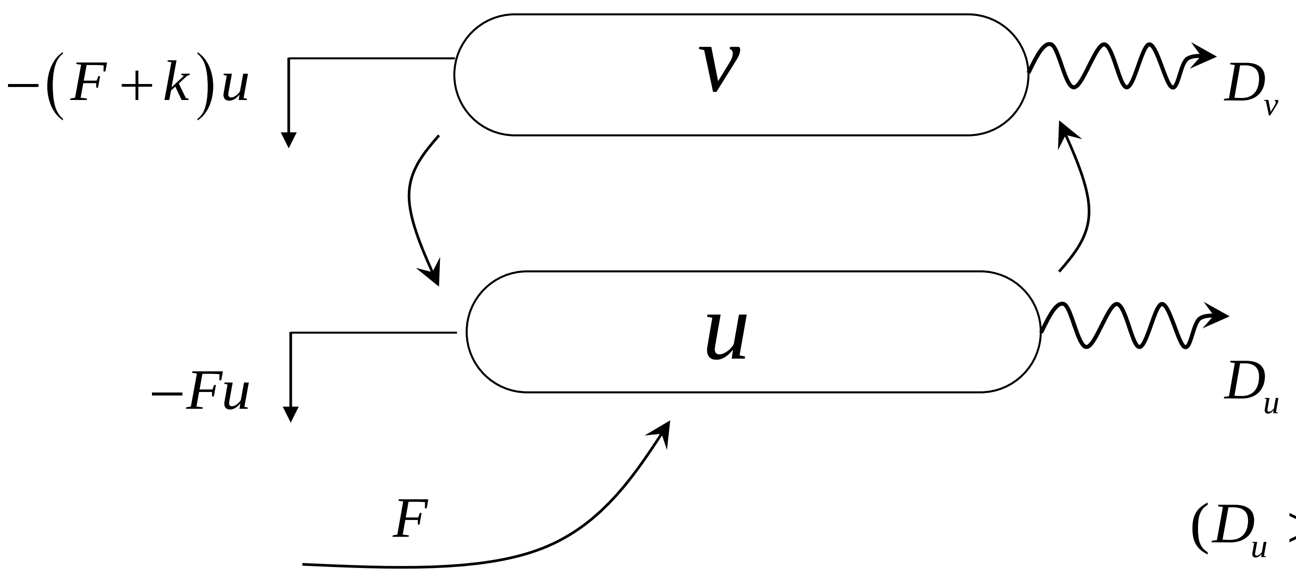
$$\frac{\partial u}{\partial t} = D_u \nabla^2 u - uv^2 + F(1-u)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} = D_v \nabla^2 v + uv^2 - (F+k)v$$

$$U + 2V \xrightarrow{1} 3V$$

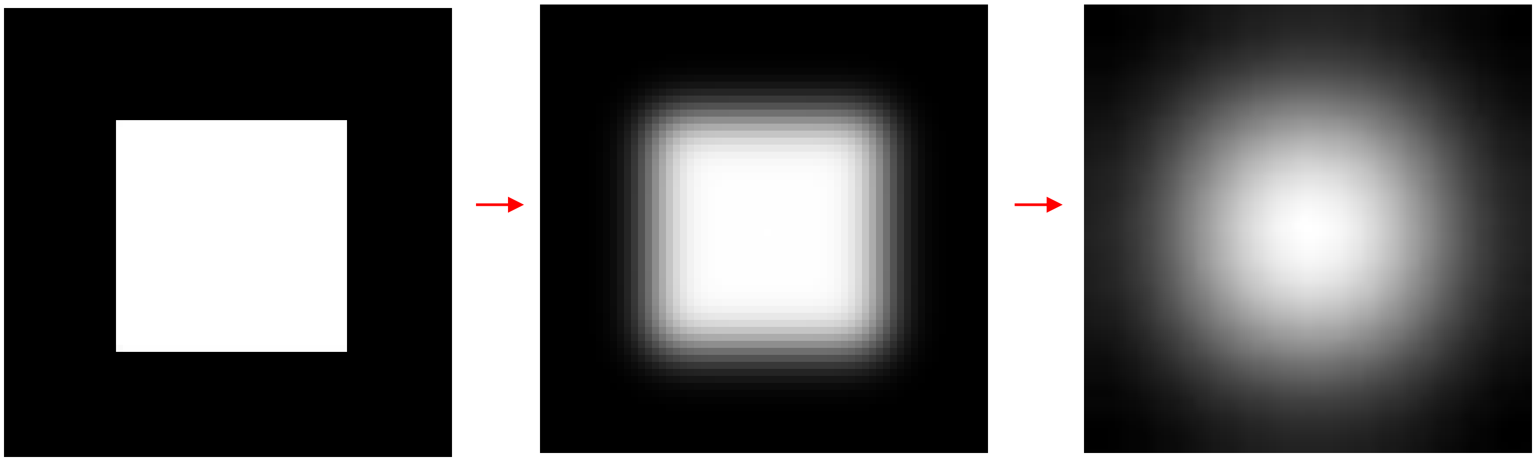
$$V \xrightarrow{k} P$$





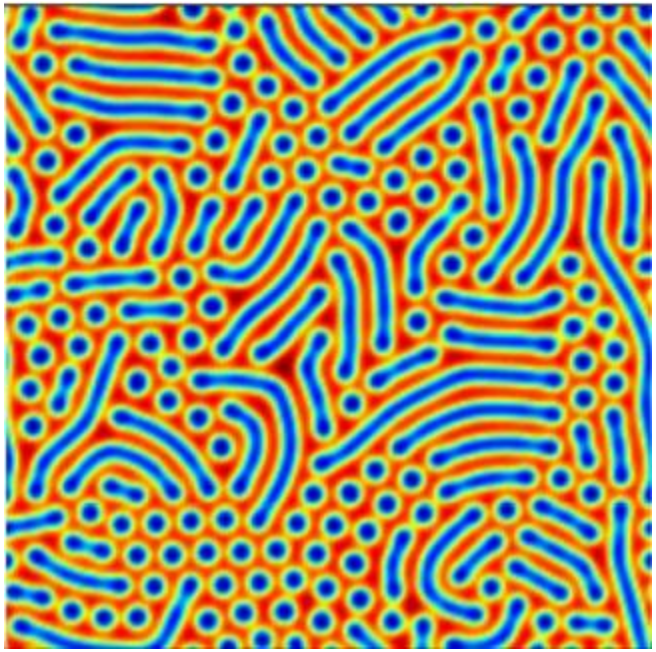
$(D_u > D_v)$

Sama dyfuzja...



Sama reakcja...

Reakcja + dyfuzja...



Zadanie 1

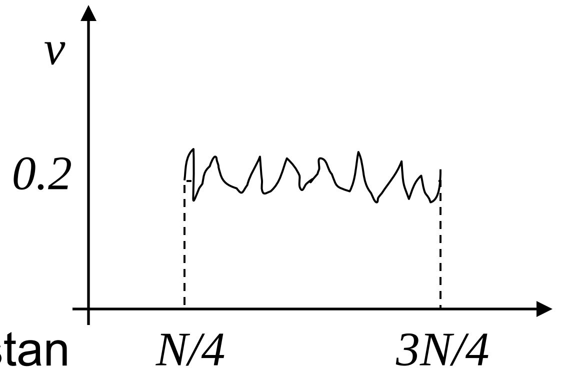
Zaimplementuj jednowymiarową wersję układu Graya-Scotta:

- podziel odcinek (0,2) na N=100 elementarnych przedziałów o długości dx=0.02
- użyj periodycznych warunków brzegowych
- zdyskretyzuj operator Laplace'a (drugą pochodną po x)
- do ewolucji w czasie użyj algorytmu Eulera (dt=1)
- przykładowe parametry:

$$D_u=2\cdot 10^{-5},\ D_v=1\cdot 10^{-5},\ F=0.025,\ k = 0.055$$

- jako warunek początkowy przyjmij

```
u = ones(N)
v = zeros(N)
xs= np.arange(N)
for i in range(N/4,3*N/4):
                    u[i] = random()*0.2+0.4
                    v[i] = random()*0.2+0.2
```



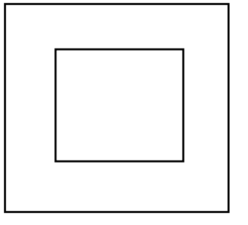
Jak układ będzie ewoluował w czasie? Czy osiągnie stan stacjonarny? Jaka skala długości będzie charakteryzowała powstałą strukturę? Co zmieni się dla innych F i k?

Zadanie 2

Zaimplementuj dwuwymiarową wersję układu Graya-Scotta:

- stwórz siatkę 100x100 oraz dx=dy=0.02
- znów użyj periodycznych warunków brzegowych i $D_u/D_v=2$
- jako warunek początkowy przyjmij

```
for i in range(N/4,3*N/4):
        for j in range(N/4,3*N/4):
        U[i][j] = random()*0.2+0.4
                V[i][j] = random()*0.2+0.2
```



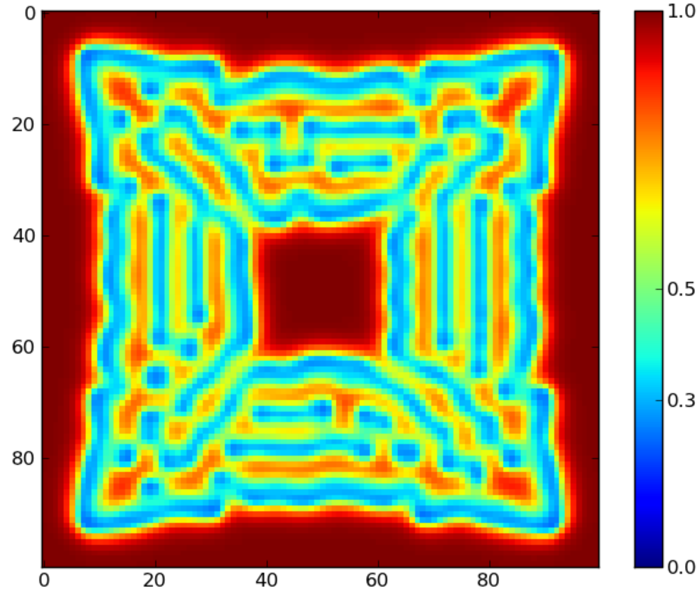
Jak wygląda ewolucja układu dla różnych wartości *F* i *k*, np.

F = 0.025	F = 0.03	F= 0.01	F=0.04	F=0.06	F=0.037
k = 0.055	k = 0.062	k= 0.047	k=0.07	k=0.0615	k=0.06

Zadanie ekstra: zrób systematyczny diagram fazowy zachowania układu dla k=0.062 i różnych wartości F

Wizualizacja:

```
import matplotlib
import matplotlib.pyplot as plt
fig=plt.figure()
ax=fig.add_subplot(111)
cax = ax.imshow(u, interpolation='nearest')
cax.set_clim(vmin=0, vmax=1)
cbar = fig.colorbar(cax, ticks=[0,0.3, 0.5,1], orientation='vertical')
plt.clf()
```



Więcej o układzie:

- http://mrob.com/pub/comp/xmorphia/
- http://groups.csail.mit.edu/mac/projects/amorphous/GrayScott/
- http://www.aliensaint.com/uo/java/rd/
- http://www.joakimlinde.se/java/ReactionDiffusion/
- http://complex.upf.es/~andreea/PACE/Self-replicating_spots.html
- J. E. Pearson., Complex patterns in a simple system, Science, 261:189-192, 1993.