Układ Brusselator

Mateusz Szczepański

Układ Brusselator to jeden z najprostszych teoretycznych modeli opisujących zjawisko reakcji autokatalizy dwóch związków chemicznych. W poniższym rozważaniach u i v to stężenia tychże związków.

1 Rozważany układ równań na odcinku

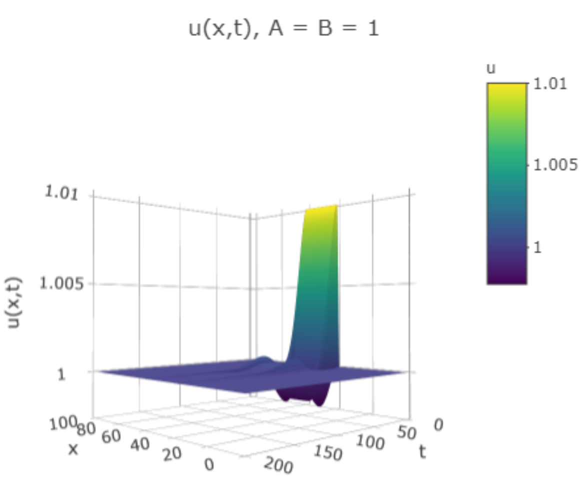
Rozważamy układ równań różniczkowych dla $u := u(x,t)$ oraz $v := v(x,t)$. Przyjmijmy $x \in [0,1]$.

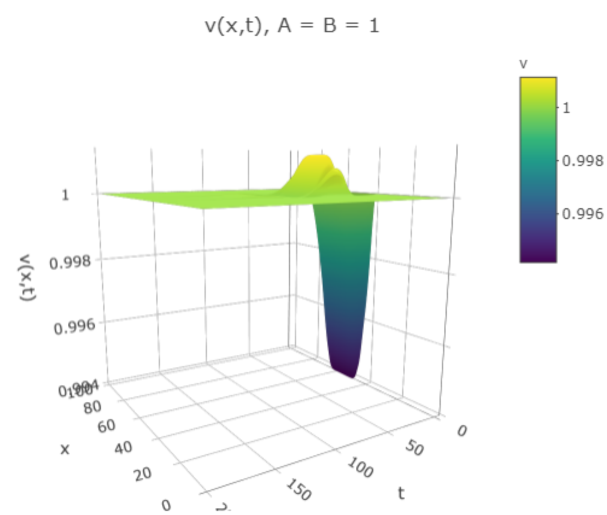
$$\begin{cases} u_t = D_u u_{xx} + A - (B+1)u + u^2 v \\ v_t = D_v v_{xx} + Bu - u^2 v \\ u(x,0) = A \\ v(x,0) = \frac{B}{A} \\ u_\eta(x,t) = v_\eta(x,t) = 0 \end{cases}$$

Układ będziemy rozważać dla warunku początkowego $u(x,0) = A$, $v(x,0) = B/A$ oraz dla warunków brzegowych Neumanna czyli $u_\eta(x,t) = v_\eta(x,t) = 0$, gdzie η oznacza wektor normalny skierowany do brzegu naszej przestrzeni $[0,1]$. D_u, D_v to stałe dyfuzji odpowiednio dla funkcji u i v.
Łatwo możemy obliczyć, że stanami stacjonarnymi naszego układu są $u = A$ oraz $v = \frac{B}{A}$. Symulacje wykonany dla nieznacznie zaburzonego warunku początkowego. W jednej sytuacji dostrzeżemy stabilność układu. W drugiej będziemy mogli dostrzec zjawisko niestabilności Turinga.

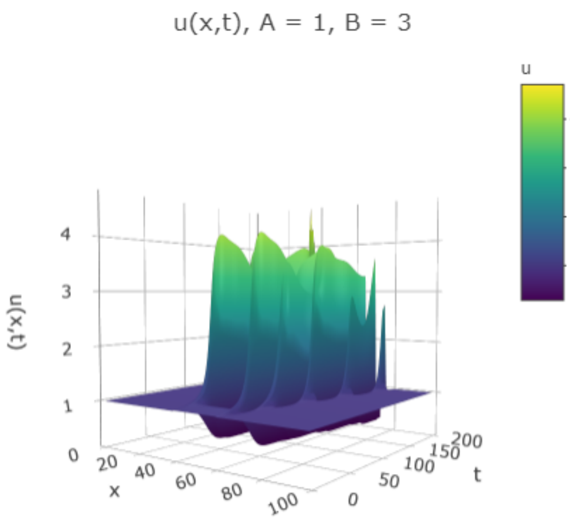
1.1 Symulacje w R

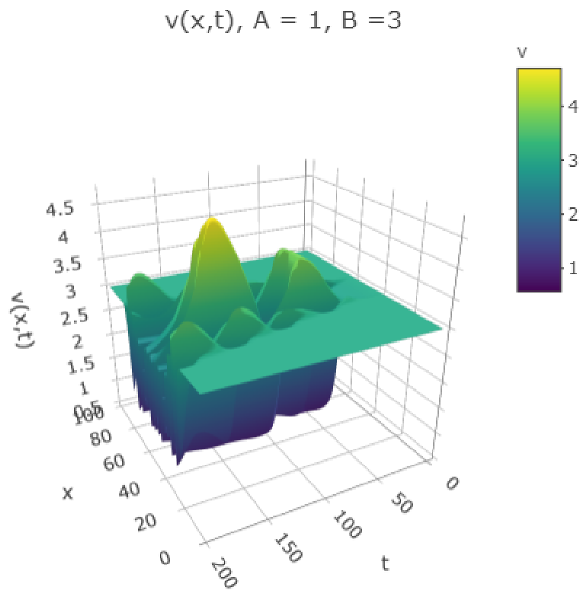
W symulacji na odcinku warunek początkowy u_0 został delikatnie zaburzony na środku. Odcinek rozważamy w sposób dyskretny z $dx = 0.01$. Stałe dyfuzji dobrano odpowiednio $D_u = 10^{-3}$ oraz $D_v = 1$. Stałe A i B opisane przy każdym wykresie. Krok czasowy dobrany $dt = 0.1$.





Możemy zauważyć, że dla $A = B = 1$ układ z czasem się stabilizuje, dla zaburzonego warunku początkowego na poziomie 10^{-2}.





W tej sytuacji, gdzie $A = 1, B = 3$ możemy zauważyć, że dla tak samo zaburzonego warunku początkowego nasz układ z czasem się destabilizuje. Jest to wcześniej wspomniana niestabilność Turinga.

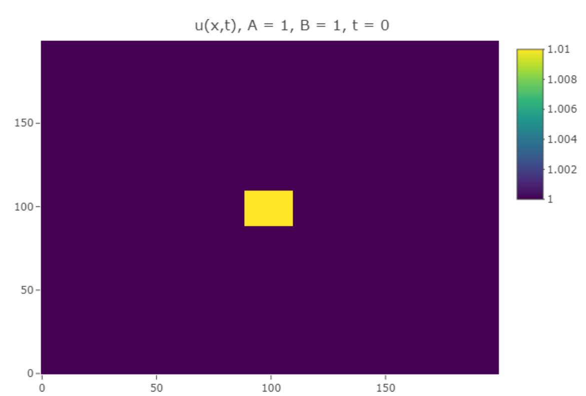
2 Rozważany układ równań na kwadracie

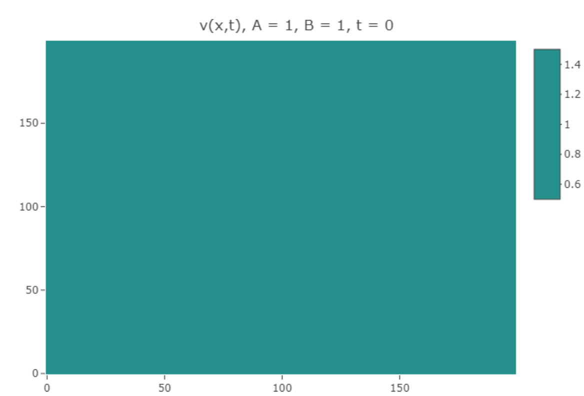
Rozważamy układ równań różniczkowych dla $u := u(x,t)$ oraz $v := v(x,t)$. Przyjmijmy $x \in [0,1]^2$.

$$\begin{cases} u_t = D_u \Delta u + A - (B+1)u + u^2 v \\ v_t = D_v \Delta v + Bu - u^2 v \\ u(x,0) = A \\ v(x,0) = \frac{B}{A} \\ u_\eta(x,t) = v_\eta(x,t) = 0 \end{cases}$$

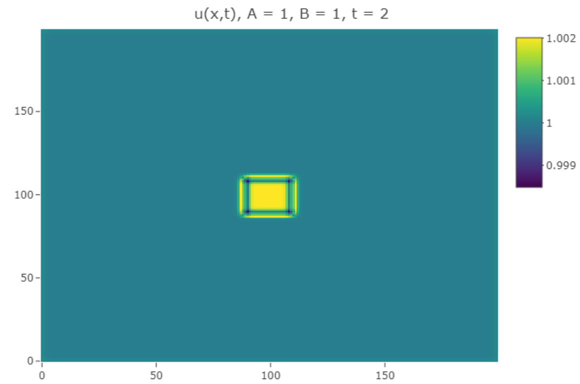
2.1 Symulacje w R

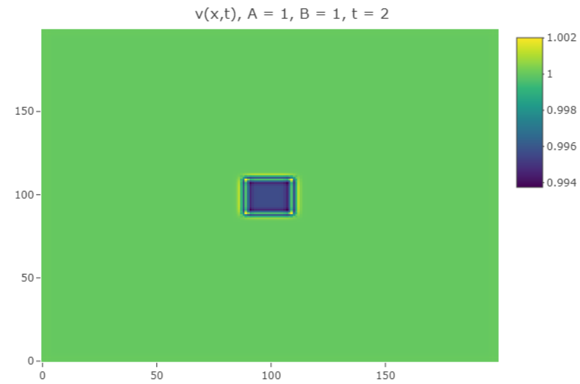
W symulacji na kwadracie warunek początkowy u_0 został delikatnie zaburzony na środku. Kwadrat rozważamy w sposób dyskretny z $dx = 0.005$. Stałe dyfuzji dobrano odpowiednio $D_u = 10^{-3}$ oraz $D_v = 1$. Stałe A i B opisane przy każdym wykresie. Krok czasowy dobrany $dt = 0.1$.

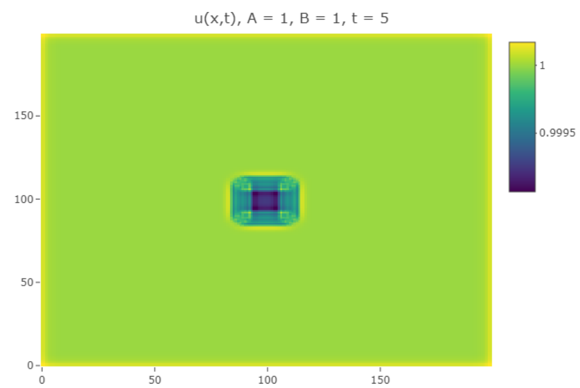


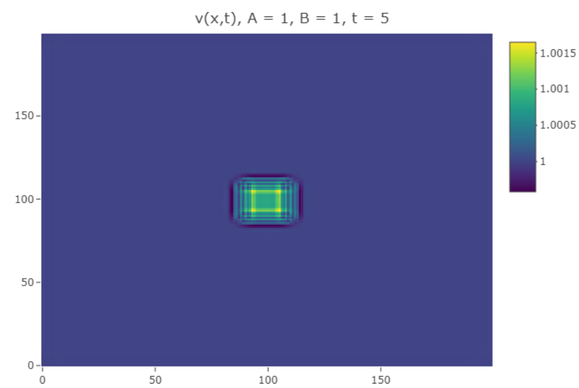


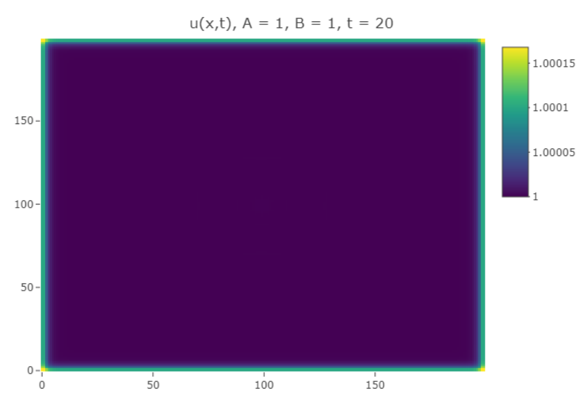
Na tych wykresach widać warunek początkowy w chwili $t = 0$. Warunek u_0 został delikatnie zaburzony na środku kwadratu. Następne wykresy będą pokazywać co się dzieje w trakcie upływu czasu dla parametrów $A = B = 1$.

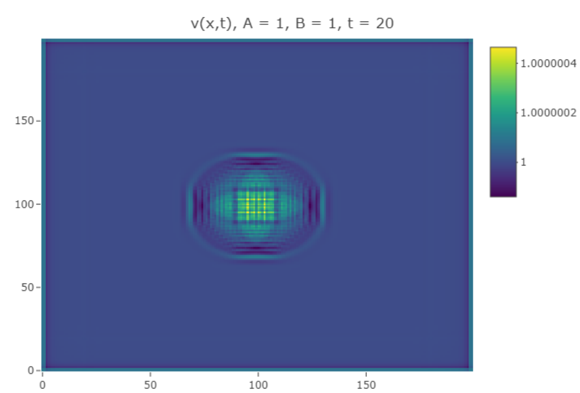








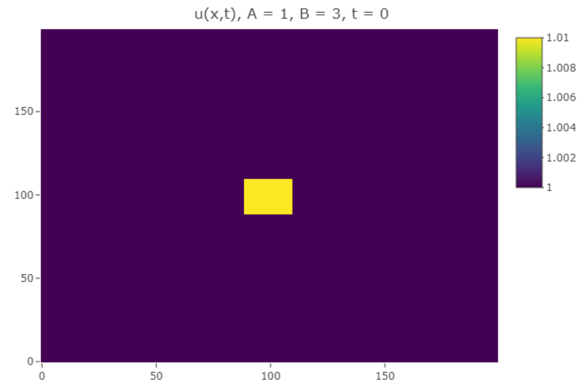


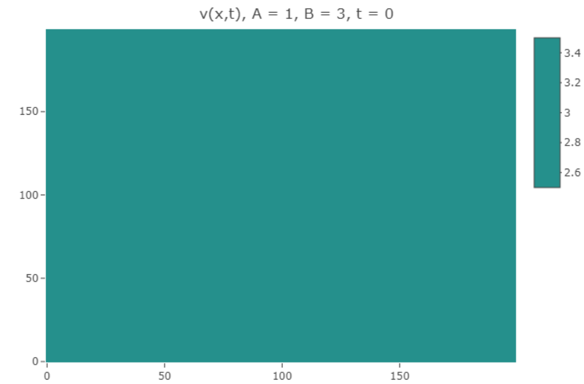


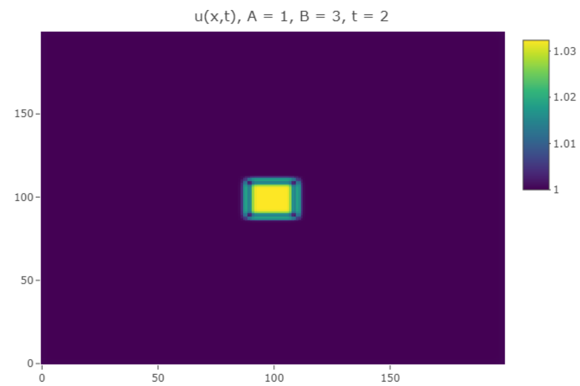
Wnioski:

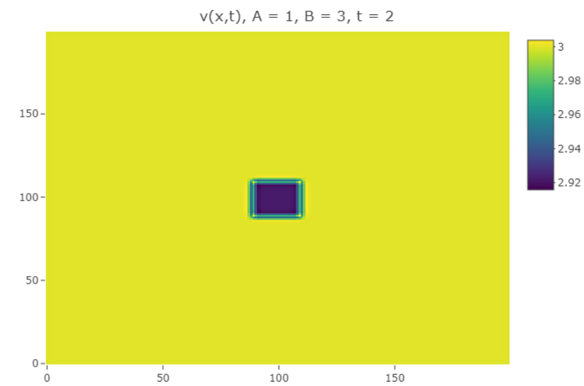
Widzimy, że dla $A = B = 1$ układ się z czasem stabilizuje. Na początku możemy zauważyć delikatną dyfuzje, lecz szybko ona się tłumi i układ dąży do stanu stacjonarnego. Możemy zauważyć, że na krawędzi kwadratu stabilizacja zachodzi wolniej, lecz kwadrat się ustabilizuje w skończonym czasie. Ostatni wykres $v(x, 20)$ może sugerować, że nie doszło do stabilizacji, lecz warto zwrócić uwagę na skalę, gdzie odstępstwa od stanu stacjonarnego są na poziomie 10^{-7}.

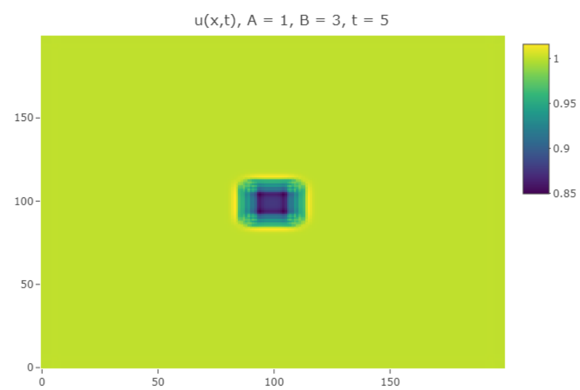
Następne symulacje dotyczą $A = 1, B = 3$, co pozwoli nam dostrzec destabilizację. Oczywiście w tym przypadku zmienia się skala dotycząca warunków początkowych.

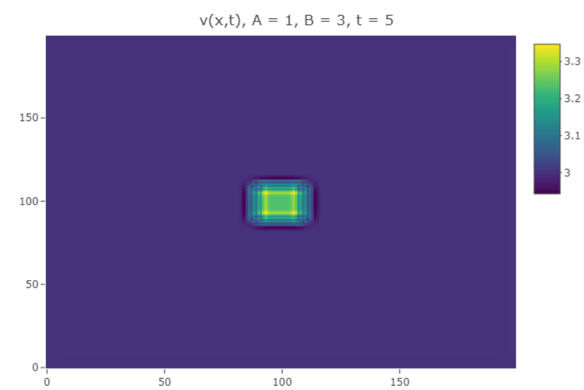

u(x,t), A = 1, B = 3, t = 0
0 50 100 150
1.01 1.008 1.006 1.004 1.002 1

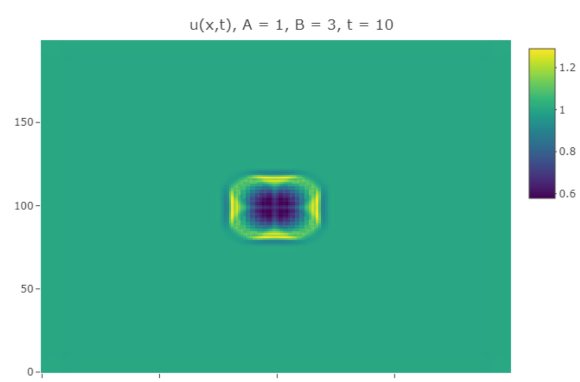

v(x,t), A = 1, B = 3, t = 0
0 50 100 150
3.4 3.2 3 2.8 2.6

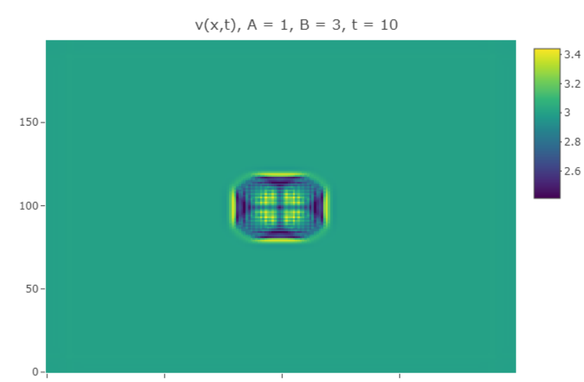

u(x,t), A = 1, B = 3, t = 2
0 50 100 150
1.03 1.02 1.01 1

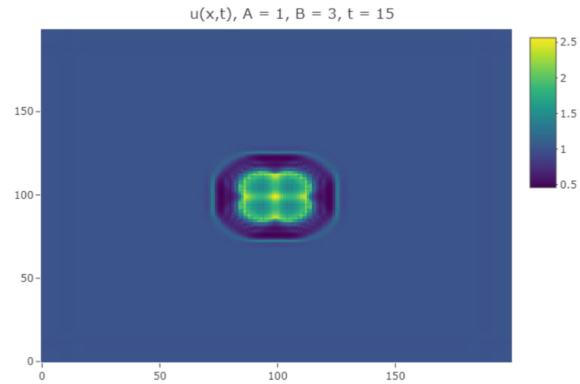
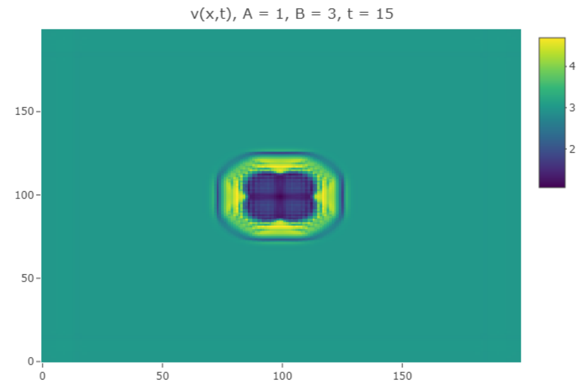
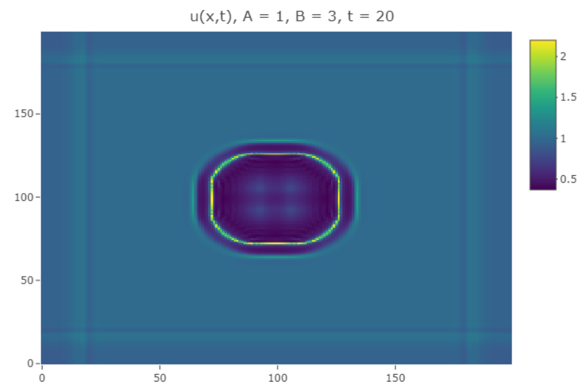
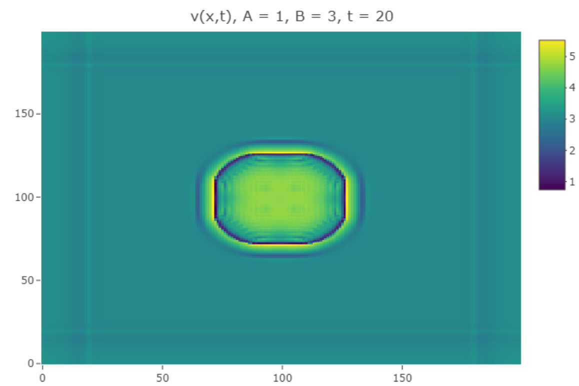
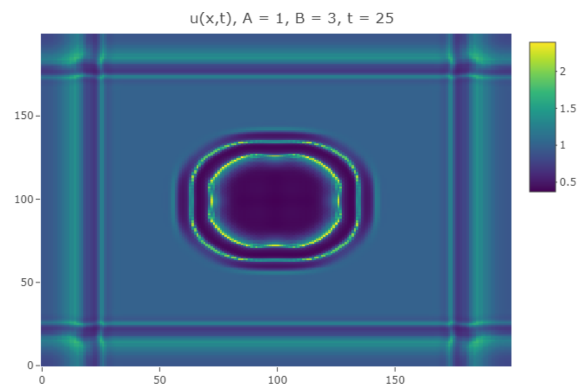
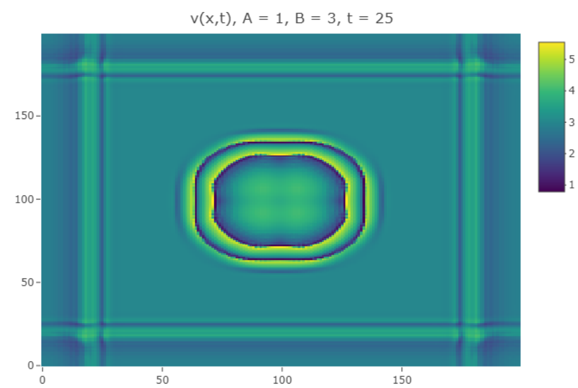
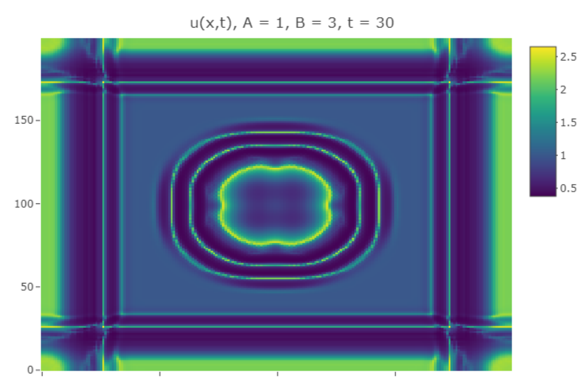
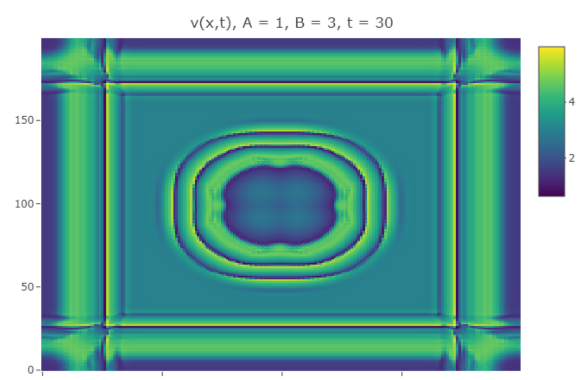

v(x,t), A = 1, B = 3, t = 2
0 50 100 150
3 2.98 2.96 2.94 2.92

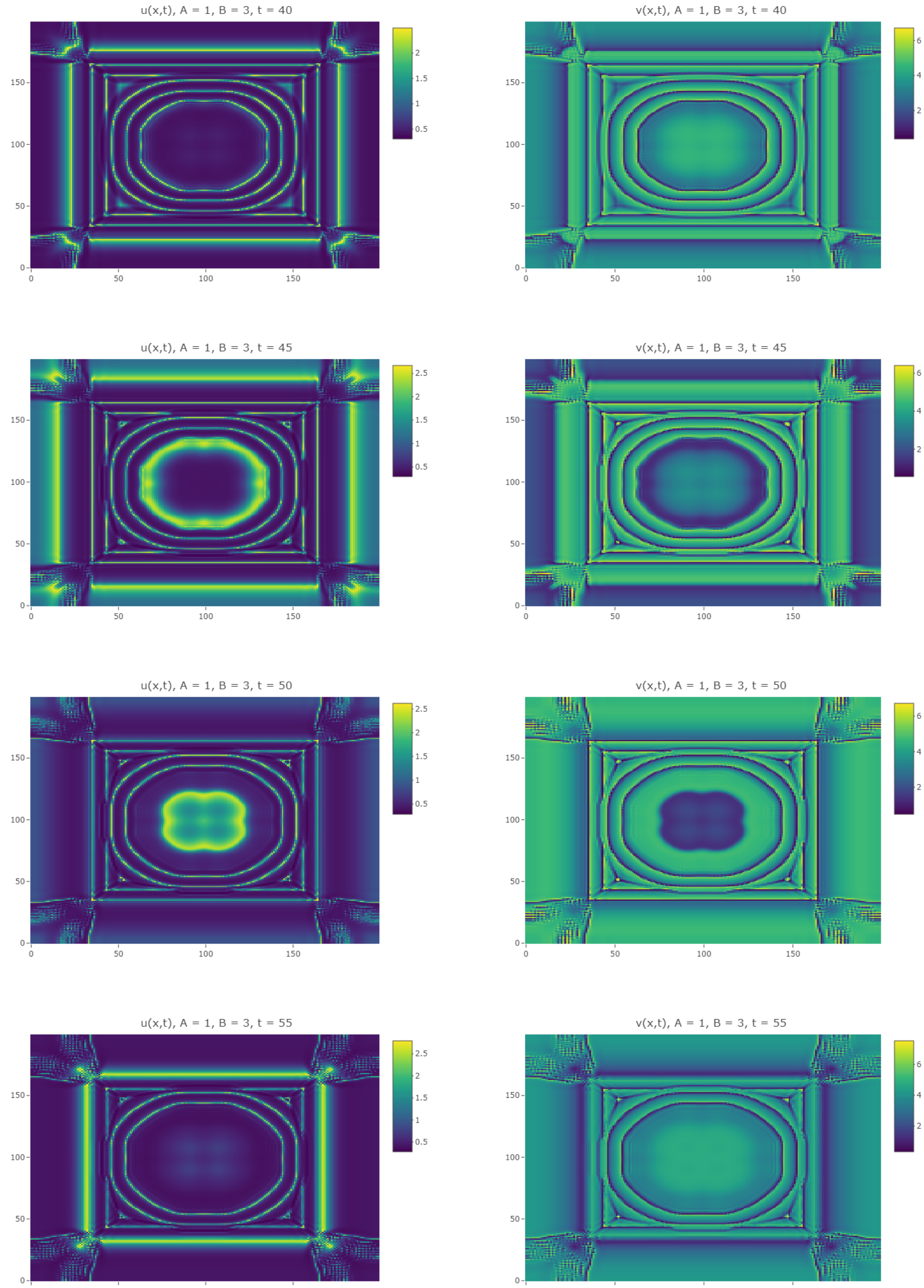

u(x,t), A = 1, B = 3, t = 5
0 50 100 150
1 0.95 0.9 0.85

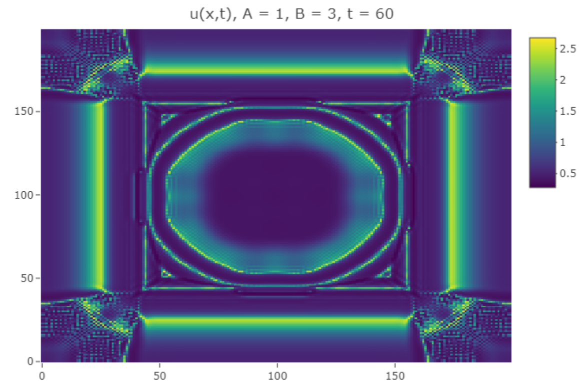

v(x,t), A = 1, B = 3, t = 5
0 50 100 150
3.3 3.2 3.1 3

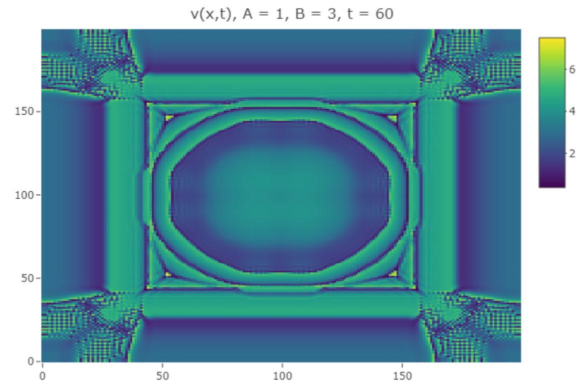

u(x,t), A = 1, B = 3, t = 10
0 50 100 150
1.2 1 0.8 0.6

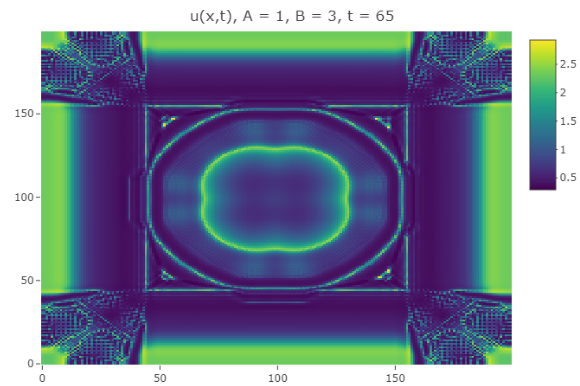

v(x,t), A = 1, B = 3, t = 10
0 50 100 150
3.4 3.2 3 2.8 2.6

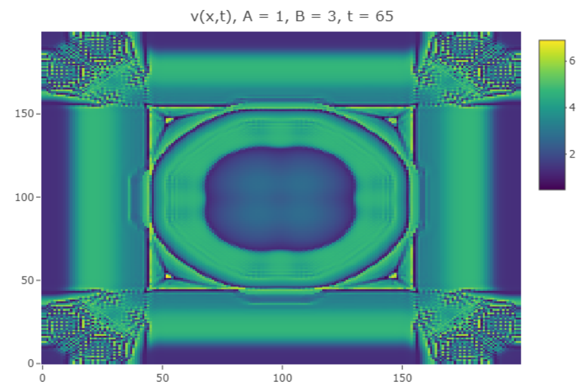

u(x,t), A = 1, B = 3, t = 15

v(x,t), A = 1, B = 3, t = 15

u(x,t), A = 1, B = 3, t = 20

v(x,t), A = 1, B = 3, t = 20

u(x,t), A = 1, B = 3, t = 25

v(x,t), A = 1, B = 3, t = 25

u(x,t), A = 1, B = 3, t = 30

v(x,t), A = 1, B = 3, t = 30

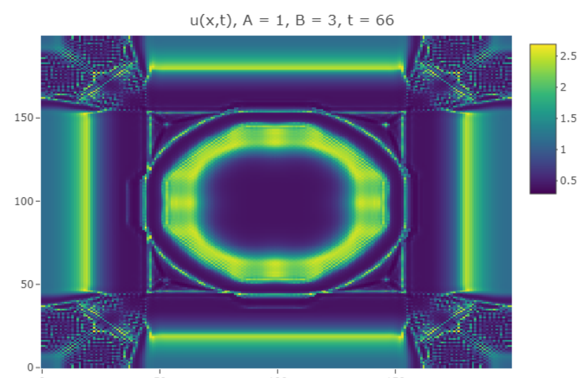

u(x,t), A = 1, B = 3, t = 40
v(x,t), A = 1, B = 3, t = 40
u(x,t), A = 1, B = 3, t = 45
v(x,t), A = 1, B = 3, t = 45
u(x,t), A = 1, B = 3, t = 50
v(x,t), A = 1, B = 3, t = 50
u(x,t), A = 1, B = 3, t = 55
v(x,t), A = 1, B = 3, t = 55

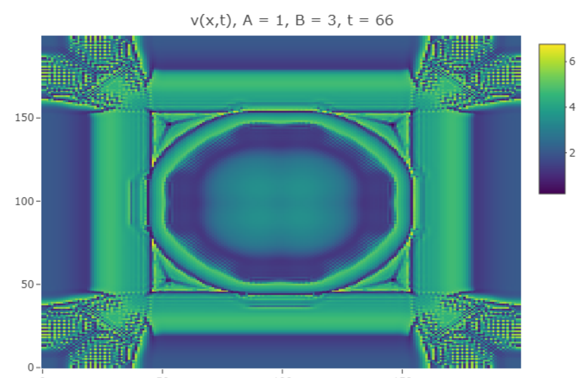

u(x,t), A = 1, B = 3, t = 60

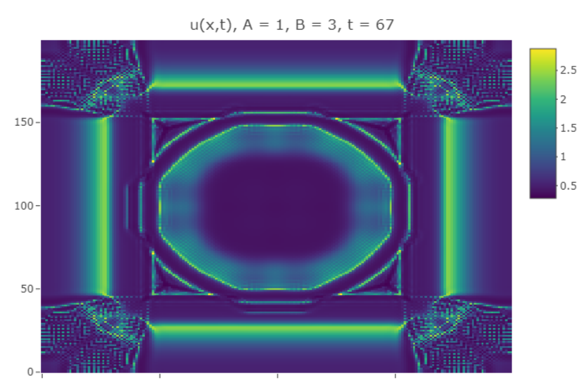

v(x,t), A = 1, B = 3, t = 60

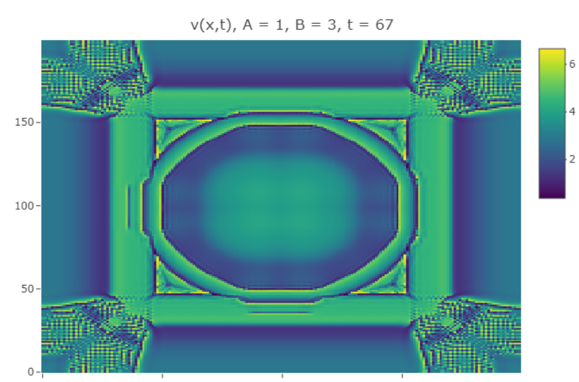

u(x,t), A = 1, B = 3, t = 65

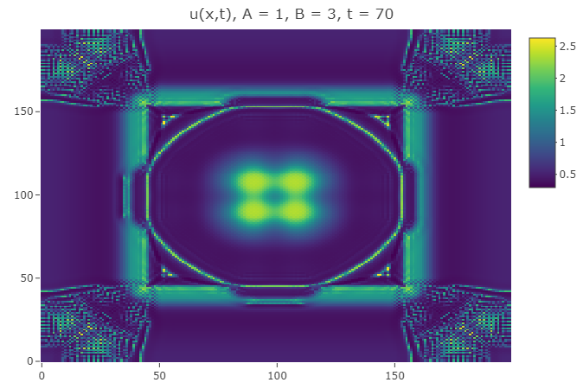

v(x,t), A = 1, B = 3, t = 65

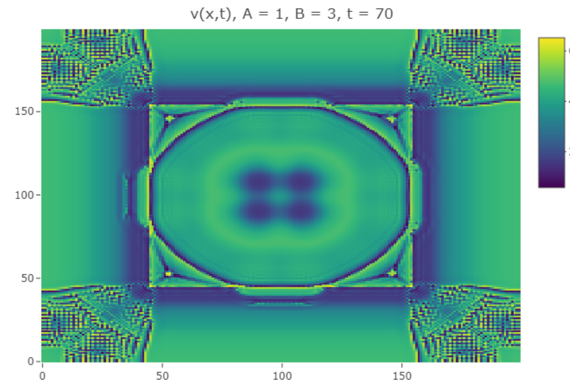

u(x,t), A = 1, B = 3, t = 66

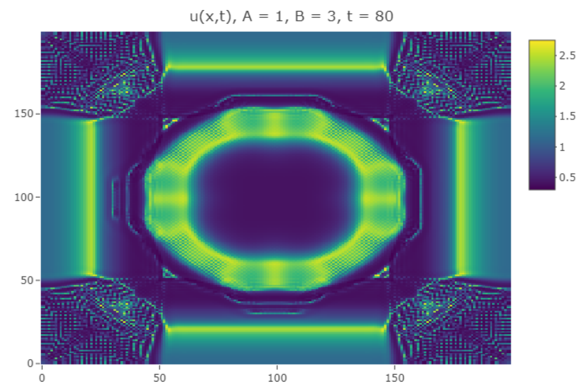

v(x,t), A = 1, B = 3, t = 66

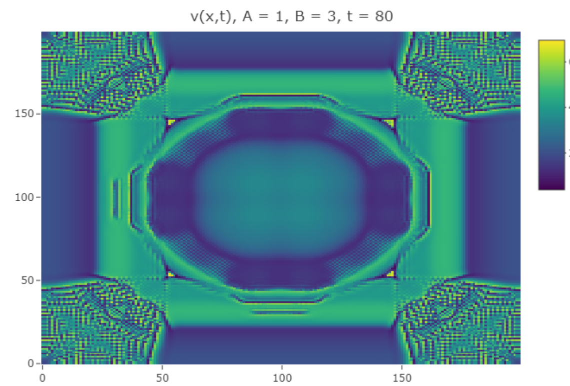

u(x,t), A = 1, B = 3, t = 67

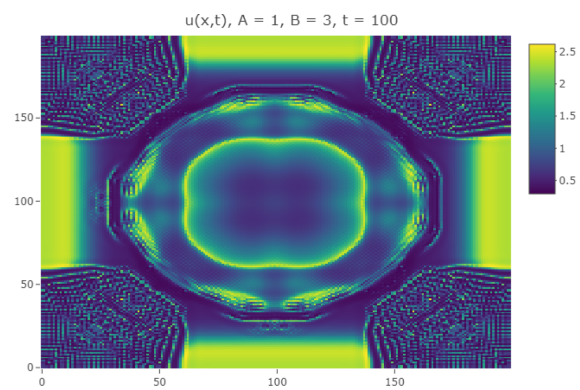

v(x,t), A = 1, B = 3, t = 67

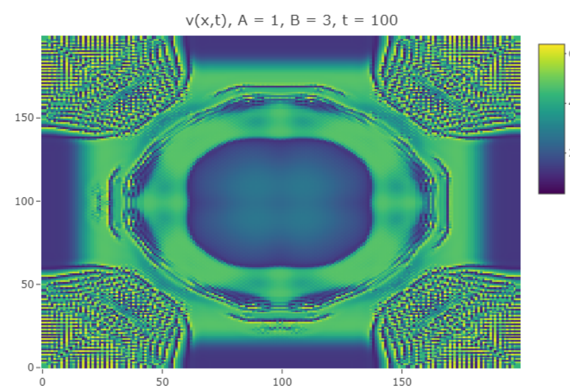












Wnioski:

Możemy zauważyć, że stabilność Turinga tworzy dywanowo-kafelkowe kształty. Dla większego czasu nasze wykresy zaczynają przybierać różne kształty. Oczywiście będą one zawsze inne dla innego doboru parametrów A, B, D_u, D_v czy też dla różnych warunków początkowych.