

УДК 517.958

© *М. Н. Назаров***НОВЫЙ ПОДХОД К МОДЕЛИРОВАНИЮ СИСТЕМ РЕАКЦИИ-ДИФФУЗИИ**

В работе рассматривается новая методика моделирования реакционно-диффузионных систем на основе систем обыкновенных дифференциальных уравнений. В отличие от специализированных численных методов, таких как метод прямых, новая методика позиционируется как чистая альтернатива на модельном уровне для уравнений в частных производных. По своему описанию новый метод во многом подобен методу конечных объемов, но в отличие от него для описания диффузии применяет статистические упрощения и принципы геометрической вероятности. Главными задачами данного подхода являются упрощение качественного анализа реакционно-диффузионных систем, а также повышение эффективности численной реализации модели. Первая задача успешно решается, так как для качественного анализа динамики модели на основе систем обыкновенных дифференциальных уравнений становится возможным использовать аппарат классической теории динамических систем. Вторая задача решается лишь отчасти, так как выигрыш при сохранении приемлемой точности для численной реализации будет существенным лишь для определенных, достаточно простых, начальных распределений молекул, а также для определенных коэффициентов диффузии. При этом для формирования критериев применимости на практике мы отдельно оцениваем погрешность моделирования с использованием данной новой методики.

Ключевые слова: реакция-диффузия, альтернатива частным производным, теория динамических систем.

Введение

Для моделирования процессов реакции-диффузии используются системы уравнений в частных производных вида $\partial u_i / \partial t = D \cdot \nabla^2 u_i + f(u_1, \dots, u_n)$. В большинстве случаев в качестве численного метода расчета для подобных уравнений используются стандартные¹ сеточные методы на основе разностных схем.

Однако с практической точки зрения подобный подход далеко не всегда рационален, так как для значительной части реальных химических процессов задача будет жесткая, а вычислительные затраты — неоправданно высокими.

На практике для упрощения моделирования реакционно-диффузионных систем, как правило, осуществляется переход от частных производных к системам обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка. Наиболее часто для этого перехода используются адаптированные численные методы, такие как метод прямых (см. [2,3]), либо строятся альтернативные модели методом конечных объемов (подробнее см. [4–6]).

В работе [7] был рассмотрен метод перехода к обыкновенным дифференциальным уравнениям, который по своему описанию близок к методу конечных объемов, но для формализации диффузии использует статистические упрощения и принципы геометрической вероятности. В рамках текущей работы мы доработаем описание метода из работы [7] и оценим погрешность итоговой модели, а также рассмотрим примеры использования метода для моделирования конкретных реакционно-диффузионных систем.

§ 1. Описание метода

В качестве модельного пространства мы будем рассматривать параллелепипеды объема $h \cdot l \cdot w$ с согласованными длинами сторон $h = a \cdot H$, $l = a \cdot L$ и $w = a \cdot W$, где параметры H, L и W являются натуральными числами. В этом случае пространство модели можно будет однозначно разбить на элементарные ячейки объема $V_a = a^3$ (см. рис. 1). Введем обозначения:

¹Пример современного использования сеточных методов см. в [1].

- 1) $d \in \{\uparrow, \downarrow, \rightarrow, \leftarrow, \odot, \otimes\}$ — направления диффузии для элементарных ячеек;
- 2) \bar{d} — противоположное² направление для d ;
- 3) $d(z, x, y)$ — соседняя ячейка с (z, x, y) по направлению³ d .

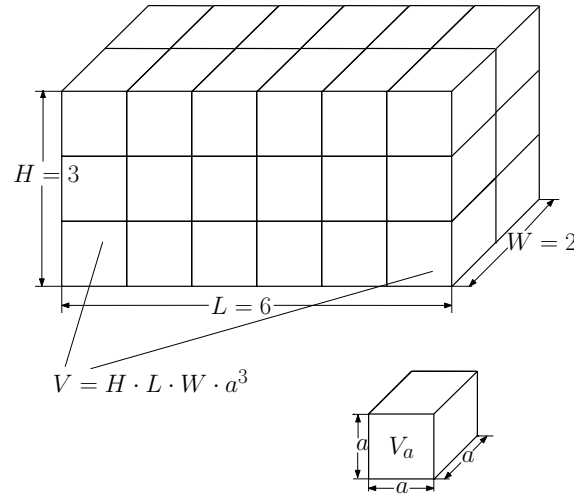


Рис. 1. Пример пространства модели

Описание диффузии в модели будет разбито на два процесса: **миграцию** вещества между ячейками пространства и **равномерное размешивание**⁴ вещества в отдельных ячейках. Для описания этих двух процессов мы вводим два типа переменных:

- численности $N_i^{(z,x,y)}(t)$ молекул, равномерно размешанных в ячейке (z, x, y) в момент t ;
- численности $\hat{N}_i^{(z,x,y)}(t)$ молекул, поступившие в граничные области ячейки в момент t .

Динамика модели будет описываться системой дифференциальных уравнений общего вида:

$$\frac{dN_i^{(z,x,y)}}{dt} = F_i^{(z,x,y)} + \text{Dif}_{i(-)}^{(z,x,y)} + \beta_i \cdot \hat{N}_i^{(z,x,y)}, \quad i = \overline{1, k}, \quad (1)$$

$$\frac{d\hat{N}_i^{(z,x,y)}}{dt} = \mathcal{F}_i^{(z,x,y)} + \text{Dif}_{i(+)}^{(z,x,y)} - \beta_i \cdot \hat{N}_i^{(z,x,y)}, \quad i = \overline{1, k}. \quad (2)$$

В уравнениях (1) и (2) величина $\text{Dif}_{i(-)}^{(z,x,y)}$ описывает суммарную диффузию молекул i за пределы ячейки (z, x, y) , а величина $\text{Dif}_{i(+)}^{(z,x,y)}$ — суммарную диффузию внутрь граничной области ячейки (z, x, y) со стороны соседних ячеек. Функции $F_i^{(z,x,y)}$ и $\mathcal{F}_i^{(z,x,y)}$ задают изменение молекул i в ячейке (z, x, y) в ходе химических реакций (для инертных веществ $F_i = \mathcal{F}_i = 0$). Параметр β_i описывает интенсивность размешивания молекул i в пределах ячейки (z, x, y) за счет внутренней диффузии из граничной области ячейки.

Для подсчета баланса диффузии молекул i в отдельной ячейке (z, x, y) мы учитываем потоки молекул i по всем допустимым направлениям диффузии:

$$\text{Dif}_{i(+)}^{(z,x,y)} = \sum_d \xi \left(\text{Emig}_{i, \bar{d}}^{d(z,x,y)} - \text{Emig}_{i, d}^{(z,x,y)} \right), \quad (3)$$

$$\text{Dif}_{i(-)}^{(z,x,y)} = \sum_d \mu \left(\text{Emig}_{i, \bar{d}}^{d(z,x,y)} - \text{Emig}_{i, d}^{(z,x,y)} \right). \quad (4)$$

²Так, если $d = (\downarrow)$, то противоположным направлением для него будет $\bar{d} = (\uparrow)$.

³К примеру, соседним с (z, x, y) кубом по направлению $d = (\downarrow)$ будет $d(z, x, y) = (z - 1, x, y)$.

⁴Включение процесса равномерного размешивания вещества в модель является принципиальным нововведением по сравнению с методом конечных объемов и моделью из работы [7].

В формулах (3) и (4) функции $\xi(x) = \sigma(x) \cdot x$ и $\mu(x) = \sigma(-x) \cdot x$ выражаются либо через функцию Хевисайда $\sigma(x)$, либо через сигмоиду $\sigma^c(x) = 1/(1 + e^{-x/c})$ при $c \rightarrow 0$ и $c > 0$.

Поток молекул $\text{Emig}_{i,d}^{(z,x,y)}(t)$ из ячейки (z, x, y) по направлению d может быть вычислен следующим образом (вывод формулы см. в работе [7]):

$$\text{Emig}_{i,d}^{(z,x,y)} = \frac{3 \cdot N_i^{(z,x,y)} \cdot r_i}{16 \cdot t_r \cdot a} + \frac{\Delta_{(z,x,y)}^{d,i}}{V_i \cdot M_{(z,x,y)}^d \cdot t_r}. \quad (5)$$

В формуле (5) величина r_i задает максимальное расстояние, на которое за время t_r могут сместиться молекулы i , а V_i — это объем, который занимает отдельная молекула i .

Замечание 1. Частота диффузии должна быть меньше единицы, и, как следствие, получаем ограничение на параметры: $3 \cdot r_i \leq 16 \cdot t_r \cdot a$. Если воспользоваться уравнением связи $r_i = \sqrt{2 \cdot D \cdot t_r}$, где D — коэффициент диффузии, то мы можем записать в итоге неравенство

$$r_i \geq \frac{3D}{8a}. \quad (6)$$

Параметр $M_{(z,x,y)}^d$ в формуле (5) равен числу различных типов молекул, которые в момент времени t расположены в одной из двух ячеек: либо в (z, x, y) , либо в соседней ячейке $d(z, x, y)$.

$$M_{(z,x,y)}^d = \begin{cases} 1, & \text{если } N_i^{(z,x,y)} = N_i^{d(z,x,y)} = 0 \ (\forall i); \\ \left| \left\{ i \mid N_i^{(z,x,y)} > 0 \vee N_i^{d(z,x,y)} > 0 \right\} \right|, & \text{— в противном случае.} \end{cases}$$

Коэффициент $\Delta_{(z,x,y)}^{d,i}$ в формуле (5) дает оценку относительной заполненности граничных областей ячеек (z, x, y) и $d(z, x, y)$ молекулами типа i отдельно от остальных типов:

$$\Delta_{(z,x,y)}^{d,i} = \frac{\Delta_{(z,x,y)}^d \cdot \hat{N}_i^{(z,x,y)}}{\sum_{\hat{N}_p > 0} \hat{N}_p^{(z,x,y)}}. \quad (7)$$

Обозначим Δl максимальное расстояние, на которое могут сместиться молекулы: $\Delta l = \max r_i$. Коэффициент $\Delta_{(z,x,y)}^d$ в формуле (7) вводится для определения общей заполненности граничных областей ячеек (z, x, y) и $d(z, x, y)$ сверх допустимого значения $(\Delta l \cdot a^2)$:

$$\Delta_{(z,x,y)}^d = \xi \left(\max \left\{ L_{(z,x,y)}^d, L_{d(z,x,y)}^{\bar{d}} \right\} - \Delta l \cdot a^2 \right) \cdot \text{sign} \left(L_{(z,x,y)}^d - L_{d(z,x,y)}^{\bar{d}} \right). \quad (8)$$

В уравнении (8) в качестве ξ используется пороговая функция $\xi(x) = \sigma(x) \cdot x$, где $\sigma(x)$ — это либо функция Хевисайда, либо приближенная к ней $\sigma^c(x) = 1/(1 + e^{-x/c})$ сигмоидная функция при $c \rightarrow 0$. Вторая функция в уравнении (8) — это либо функция знака sign , либо приближенная к ней $\text{sign}_{\tan}(x) = (2/\pi) \cdot \arctan(x/c)$ при $c \rightarrow 0$.

Величина $L_{(z,x,y)}^d$ из формулы (8) задает объем, который должны были бы занимать объекты в граничной области ячейки (z, x, y) после осуществления обмена с соседней ячейкой по направлению d . Вычислить $L_{(z,x,y)}^d$ можно по формуле

$$L_{(z,x,y)}^d = V_L^{(z,x,y)} - \delta V_L^{(z,x,y)} + \delta V_L^{d(z,x,y)}. \quad (9)$$

Величина $V_L^{(z,x,y)}$ из формулы (9) — это текущая заполненность граничной области:

$$V_L^{(z,x,y)} = \sum_i \hat{N}_i^{(z,x,y)} \cdot \frac{V_i}{k(z, x, y)}. \quad (10)$$

В этом выражении $k(z, x, y)$ — это число граничных зон у ячейки (z, x, y) . Для внутренних ячеек пространства эта величина постоянная и равна $k(z, x, y) = 6$ при $H, L, W > 2$.

Величина $\delta V_L^{(z,x,y)}$ — это потенциальный прирост суммарного объема молекул из граничной зоны, который можно разбить на две части:

$$\delta V_L^{(z,x,y)} = \delta V_F^{(z,x,y)} + \delta V_M^{(z,x,y)}. \quad (11)$$

Первое слагаемое δV_F в формуле (11) отвечает за прирост объема в результате химических реакций в масштабе граничной зоны:

$$\delta V_F^{(z,x,y)} = \sum_i \mathcal{F}_i^{(z,x,y)} \cdot \frac{V_i}{k(z, x, y)}. \quad (12)$$

Второе слагаемое $\delta V_M^{(z,x,y)}$ в (11) отвечает за прирост объема в результате обмена молекулами с граничной зоной ячейки $d(z, x, y)$:

$$\delta V_M^{(z,x,y)} = \sum_i \frac{3}{16} \cdot N_i^{(z,x,y)} \cdot \frac{V_i \cdot r_i}{a}. \quad (13)$$

Доказательство корректности выбора коэффициента $\Delta_{(z,x,y)}^d$ аналогично доказательству из [7].

Для оценки параметра β_i в уравнениях (1) и (2) мы постулируем, что размешенными будут считаться молекулы, которые сместились на расстояние $a/2$ в рамках ячейки. Используя уравнение связи $r = \sqrt{2Dt_{s_i}}$, получаем оценку времени $t_{s_i} = a^2/(4D)$. Пусть для определенности за это время растворится $(1 - c)$ процентов от исходных $\hat{N}_i(0)$, где $0 < c \ll 1$. Рассматривая случай одной лишь внутренней диффузии, мы можем записать следующее выражение для численностей $\hat{N}_i(t)$:

$$\hat{N}_i(t) = \hat{N}_i(0) \cdot e^{-\beta_i t}.$$

Подставляя в эту формулу наши данные $\hat{N}_i(t_{s_i}) = (1 - c) \cdot \hat{N}_i(0)$ и $t_{s_i} = a^2/(4D)$, мы получаем в результате оценку для параметра β_i :

$$\beta_i = \frac{4D}{a^2} \log(c^{-1}) = \log\left(c^{-\frac{4D}{a^2}}\right). \quad (14)$$

Практическая область применимости изложенного метода ограничена, с одной стороны, условием (6), а с другой — требованием, чтобы радиусы r_i были на несколько порядков меньше длины ячеек: $r_i \leq a \cdot 10^{-2}$. Для одновременного выполнения данных условий должно быть

$$a \geq 5 \sqrt{\frac{3D_i}{2}} \quad \forall i = \overline{1, k}. \quad (15)$$

Уменьшая параметр a можно добиться более точного описания реакционной системы в пространстве, но при этом нужно учитывать неравенство (15), а также тот факт, что элементарные ячейки должны быть по объему значительно больше⁵ отдельных молекул: $a \gg \sqrt[3]{V_i}$.

§ 2. Сравнительный анализ точности метода

Для начала мы проведем анализ точности модели из работы [7] путем сравнения с эталонной моделью реакции-диффузии на основе частных производных. Затем мы сравним точность модели (1)–(14) с предсказаниями модели на частных производных и модели из работы [7].

Для упрощения положим, что на начальный момент времени во всех ячейках пространства вещество было распределено равномерно, а само вещество инертно ($\forall i F_i = 0$). В этом случае основным источником погрешности для модели [7] будет сквозной пробег молекул через одну ячейку при расчете усредненной диффузии (см. рис. 2). Ошибка сквозного пробега возникает

⁵В противном случае нельзя будет считать молекулы точечными объектами.

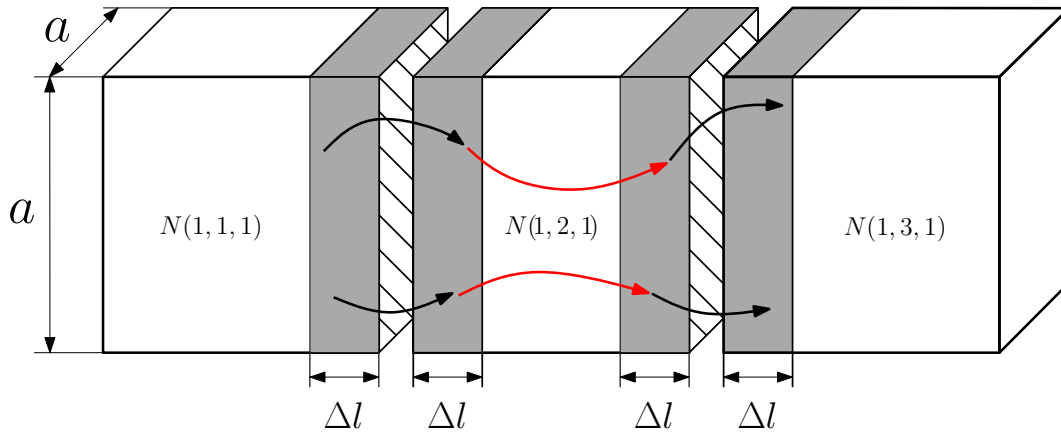


Рис. 2. Ошибка сквозного пробега: диффузия вдоль элементарного куба за нулевое время

ввиду того, что во всех ячейках распределение молекул полагается равномерным во все моменты времени. Таким образом, модель из [7] игнорирует диффузию вещества в рамках отдельной ячейки, а любые поступившие в ячейку молекулы могут сразу же быть переданы в следующую ячейку (см. сквозные стрелки на рис. 2).

Постановка задачи 1. Для оценки ошибки модели из [7] мы рассмотрим простейший случай:

- в модели участвует ровно один тип молекул p (с параметрами V_p и r_p);
- на начальный момент времени молекулы p заполняют левую ячейку на рисунке 2, а две другие ячейки являются пустыми:

$$N(1, 1, 1) = N_{\max} = a^3/(V_p), \quad N(1, 2, 1) = N(1, 3, 1) = 0.$$

Составим систему⁶ (1) из [7] для примера на рисунке 2, обозначив за α константу $\alpha = 3r_p/(16t_r a)$:

$$\begin{cases} \frac{dN(1, 1, 1)}{dt} = -\alpha \cdot N(1, 1, 1) + \alpha \cdot N(1, 2, 1), \\ \frac{dN(1, 2, 1)}{dt} = \alpha \cdot N(1, 1, 1) - 2\alpha \cdot N(1, 2, 1) + \alpha \cdot N(1, 3, 1), \\ \frac{dN(1, 3, 1)}{dt} = \alpha \cdot N(1, 2, 1) - \alpha \cdot N(1, 3, 1). \end{cases}$$

Собственными значениями для данной системы уравнений будут $\lambda_1 = 0, \lambda_2 = -\alpha, \lambda_3 = -3\alpha$. Собственные векторы, которые будут им соответствовать — это $u_1 = (1, -2, 1)^T, u_2 = (-1, 0, 1)^T$ и $u_3 = (1, 1, 1)^T$.

Общее решение системы с учетом первой кратности собственных чисел $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$ примет вид

$$\begin{pmatrix} N(1, 1, 1)(t) \\ N(1, 2, 1)(t) \\ N(1, 3, 1)(t) \end{pmatrix} = \frac{N_{\max}}{6} \cdot e^{-3\alpha t} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ -2 \\ 1 \end{pmatrix} - \frac{N_{\max}}{2} \cdot e^{-\alpha t} \cdot \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} + \frac{N_{\max}}{3} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Сформулируем теперь рассмотренную задачу в терминах модели с частными производными. Классическое уравнение диффузии для молекулярной плотности $[N](t)$ в случае постоянного коэффициента⁷ диффузии $D = r_p^2/(2t_r)$ принимает следующий вид:

$$\frac{\partial[N]}{\partial t} = D \cdot \left(\frac{\partial^2[N]}{\partial x^2} + \frac{\partial^2[N]}{\partial y^2} + \frac{\partial^2[N]}{\partial z^2} \right).$$

⁶Мы игнорируем все члены, отвечающие за компенсацию переполнения, поскольку в работе [7] при наличии всего одного типа молекул в модели они всегда равны нулю.

⁷Для его оценки использовано классическое уравнение для среднего радиуса смещения: $r(t) = \sqrt{2Dt}$.

При этом координаты ограничены значениями $0 \leq z \leq a$, $0 \leq x \leq 3a$, $0 \leq y \leq a$, и действуют начальные условия $[N](z, x, y)(0) = 0$ при $x > a$ и $[N](z, x, y)(0) = N_{\max}/a^3$ при $x \leq a$. Дополнительно к этому граница модельного пространства полагается идеально отражающей. Собственными функциями оператора диффузии для данного случая будут соответственно

$$v_{n,m,k} = A_{n,m,k} \cdot \cos\left(\pi n \frac{z}{a}\right) \cdot \cos\left(\pi m \frac{x}{3a}\right) \cdot \cos\left(\pi k \frac{y}{a}\right).$$

В свою очередь, собственными значениями оператора диффузии будут следующие константы:

$$\lambda_{n,m,k} = \frac{-D\pi^2}{a^2} \cdot (n^2 + m^2/9 + k^2).$$

Скалярное произведение для функций в рассматриваемом пространстве рассчитывается как

$$(f, g) = \int_0^a dz \int_0^{3a} dx \int_0^a f(z, x, y)g(z, x, y) dy.$$

Используя условие нормировки — скалярное произведение $(f, g) = 1$ для всех собственных векторов $(v_{n,m,k})$, — можно легко найти константы $A_{n,m,k}$ (в формуле числа $n, m, k \geq 1$):

$$A_{0,0,0} = \frac{1}{\sqrt{3a^3}}; \quad A_{n,0,0} = A_{0,m,0} = A_{0,0,k} = \sqrt{\frac{2}{3a^3}};$$

$$A_{n,k,0} = A_{0,m,k} = A_{n,0,m} = \sqrt{\frac{4}{3a^3}}; \quad A_{n,k,m} = \sqrt{\frac{8}{3a^3}}.$$

Общее решение для молекулярной плотности $[N]$ может быть записано в следующем виде:

$$[N](z, x, y)(t) = \sum_{n,m,k=0}^{\infty} e^{\lambda_{n,m,k}(t-t_0)} \cdot v_{n,m,k}(z, x, y) \int_0^a dz \int_0^{3a} dx \int_0^a v_{n,m,k}(z, x, y) \cdot [N](z, x, y)(0) dy.$$

Поскольку интегралы от $\cos(\pi n z/a)$ и $\cos(\pi k y/a)$ в пределах от 0 до a дают ноль, то в итоговой сумме остаются только слагаемые для разных m , а остальные индексы $n = k = 0$. В итоге после интегрирования мы получаем следующее выражение для молекулярной плотности $[N]$:

$$[N](z, x, y)(t) = \frac{N_{\max}}{a^3} \left\{ \frac{1}{3} + \sum_{m=1}^{\infty} 2e^{\lambda_m t} \cdot \frac{\sin(\pi m/3)}{\pi m} \cdot \cos\left(\pi m \frac{x}{3a}\right) \right\}, \quad \lambda_m = -D \cdot \left(\frac{\pi m}{3a}\right)^2.$$

Для оценки ошибки сквозного пробега необходимо получить точное значение для численности молекул в третьей ячейке (при $2a \leq x \leq 3a$) на рисунке 2. Для этого нужно взять интеграл

$$\bar{N}(1, 3, 1)(t) = \int_0^a dz \int_{2a}^{3a} dx \int_0^a [N](z, x, y)(t) dy.$$

Таким образом, итоговое выражение $\bar{N}(1, 3, 1)(t)$ для эталонной модели получается равным

$$\bar{N}(1, 3, 1)(t) = N_{\max} \left\{ \frac{1}{3} - \sum_{m=1}^{\infty} \frac{6e^{\lambda_m t}}{(\pi m)^2} \cdot \sin(\pi m/3) \cdot \sin(2\pi m/3) \right\}, \quad \lambda_m = -D \cdot \left(\frac{\pi m}{3a}\right)^2.$$

Оценка точности модели. Максимальное значение для мгновенной ошибки ε_{\max} модели [7] можно оценить как:

$$\varepsilon_{\max} = \max_t |\bar{N}(1, 3, 1)(t) - N(1, 3, 1)(t)|.$$

Рассмотрим оценку ошибки сквозного пробега модели [7] на конкретных примерах, выбирая значения для N_{\max} и D , а остальные параметры вычисляя с помощью уравнений связи.

Пример 1. Для начала положим $N_{\max} = 1000$ и коэффициент диффузии $D = 0.02$. Если воспользоваться уравнениями связи, то длина элементарного ребра будет $a \sim 5\sqrt{3D/2}$, радиус свободного пробега — $r_p \sim 0.01 \cdot a$, и время пробега — $t_r = r_p^2/(2D)$. В результате мы получим верхний график для ошибки $\varepsilon(t) = |\bar{N}(1, 3, 1)(t) - N(1, 3, 1)(t)|$ на рисунке 3, а значение $\varepsilon_{\max} \approx 325$. Если мы изменим начальные данные на $N_{\max} = 10\,000$ и $D = 0.0001$, то, применяя те же уравнения связи для a, r_p и t_r , мы получим аналогичный график для функции ошибки $\varepsilon(t)$ (см. нижнюю часть рис. 3), а значение мгновенной ошибки $\varepsilon_{\max} \approx 3250$ пропорционально увеличится.

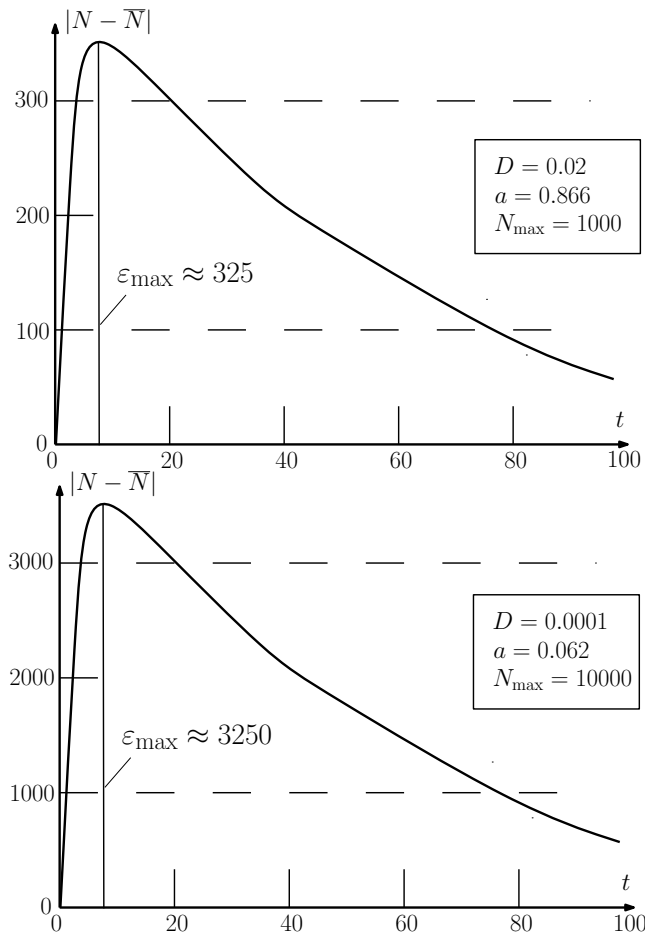


Рис. 3. Оценка ошибки свободного пробега как функции от времени для примера 1

Замечание 2. Относительная ошибка $\delta_{\max} = \varepsilon_{\max}/N_{\max}$ будет величиной постоянной и не зависящей от выбора N_{\max} и D , при условии, что для параметров a, r_p и t_r используются одинаковые уравнения связи. В частности, для рассмотренного примера 1 получим $\delta_{\max} = 0.325$, а значит, на коротких временных интервалах модель [7] может быть использована для случая неоднородного распределения молекул с уравнениями связи из примера 1. Однако на длительных временных интервалах при существенно неоднородном начальном распределении молекул модель [7] будет давать крайне плохое описание диффузии, достигая пиковой ошибки в 32 %.

Постановка задачи 2. Для оценки ошибки модели (1)–(14) мы постулируем, что

- в модели участвует ровно один тип молекул p (с параметрами V_p и r_p);
- на начальный момент времени молекулы p равномерно заполняют левую ячейку на рисунке 2, а две другие ячейки являются пустыми:

$$N(1, 1, 1) = N_{\max} = a^3/(V_p), \quad N(1, 2, 1) = N(1, 3, 1) = \hat{N}(1, 1, 1) = \hat{N}(1, 2, 1) = \hat{N}(1, 3, 1) = 0.$$

Для данного примера мы не сможем пренебречь факторами компенсации $\Delta_{(z,x,y)}^d$, так как в модели (1)–(14) они позволяют косвенно учесть давление в граничных областях ячеек. Обозначив $\alpha = 3r_p/(16t_r a)$ и $\beta = (4D/a^2) \log(c^{-1})$, мы можем составить следующую систему уравнений (1) и (2) для данного примера:

$$\begin{cases} \frac{dN(1,1,1)}{dt} = \mu \left(\text{Emig}_{\leftarrow}^{(1,2,1)} - \text{Emig}_{\rightarrow}^{(1,1,1)} \right) + \beta \cdot \hat{N}(1,1,1), \\ \frac{d\hat{N}(1,1,1)}{dt} = \xi \left(\text{Emig}_{\leftarrow}^{(1,2,1)} - \text{Emig}_{\rightarrow}^{(1,1,1)} \right) - \beta \cdot \hat{N}(1,1,1), \\ \frac{dN(1,2,1)}{dt} = \mu \left(\text{Emig}_{\rightarrow}^{(1,1,1)} - \text{Emig}_{\leftarrow}^{(1,2,1)} \right) + \mu \left(\text{Emig}_{\leftarrow}^{(1,3,1)} - \text{Emig}_{\rightarrow}^{(1,2,1)} \right) + \beta \cdot \hat{N}(1,2,1), \\ \frac{d\hat{N}(1,2,1)}{dt} = \xi \left(\text{Emig}_{\rightarrow}^{(1,1,1)} - \text{Emig}_{\leftarrow}^{(1,2,1)} \right) + \xi \left(\text{Emig}_{\leftarrow}^{(1,3,1)} - \text{Emig}_{\rightarrow}^{(1,2,1)} \right) - \beta \cdot \hat{N}(1,2,1), \\ \frac{dN(1,3,1)}{dt} = \mu \left(\text{Emig}_{\rightarrow}^{(1,2,1)} - \text{Emig}_{\leftarrow}^{(1,3,1)} \right) + \beta \cdot \hat{N}(1,3,1), \\ \frac{d\hat{N}(1,3,1)}{dt} = \xi \left(\text{Emig}_{\rightarrow}^{(1,2,1)} - \text{Emig}_{\leftarrow}^{(1,3,1)} \right) - \beta \cdot \hat{N}(1,3,1). \end{cases}$$

Используя формулы (5)–(14), легко можно получить выражения для всех потоков Emig. Для примера мы приведем формулу для потока из крайней левой ячейки в среднюю $\text{Emig}_{\rightarrow}^{(1,1,1)}$:

$$\begin{aligned} \text{Emig}_{\rightarrow}^{(1,1,1)} &= \alpha \cdot N(1,1,1) + \frac{\Delta_{(1,1,1)}^{\rightarrow}}{V \cdot t_r}, \\ \Delta_{(1,1,1)}^{\rightarrow} &= \xi \left(\max \left\{ L_{(1,1,1)}^{\rightarrow}, L_{(1,2,1)}^{\leftarrow} \right\} - r_p \cdot a^2 \right) \cdot \text{sign} \left(L_{(1,1,1)}^{\rightarrow} - L_{(1,2,1)}^{\leftarrow} \right), \\ L_{(1,1,1)}^{\rightarrow} &= V \cdot \left(\hat{N}(1,1,1) + \alpha \cdot t_r \cdot \{N(1,2,1) - N(1,1,1)\} \right), \\ L_{(1,2,1)}^{\leftarrow} &= V \cdot \left(\hat{N}(1,2,1)/2 + \alpha \cdot t_r \cdot \{N(1,1,1) - N(1,2,1)\} \right). \end{aligned}$$

Выражения для остальных потоков — $\text{Emig}_{\leftarrow}^{(1,2,1)}$ и $\text{Emig}_{\rightarrow}^{(1,3,1)}$ — выводятся аналогично.

Оценка точности модели. Максимальное значение для мгновенной ошибки ε_{\max} модели (1)–(14) можно оценить по формуле

$$\varepsilon_{\max} = \max_t \left| \bar{N}(1,3,1)(t) - N(1,3,1)(t) - \hat{N}(1,3,1)(t) \right|.$$

Рассмотрим оценку ошибки ε_{\max} сквозного пробега модели (1)–(14) на конкретных примерах, выбирая значения для начальной численности N_{\max} и коэффициента диффузии D .

Пример 2. Используем те же значения для N_{\max} и D , что были задействованы в первом примере. При этом мы также воспользуемся аналогичными уравнениями связи для длины элементарного ребра $a \sim 5\sqrt{3D/2}$, радиуса $r_p \sim 0.01 \cdot a$ и времени $t_r = r_p^2/(2D)$. Для случая $N_{\max} = 1000$ и $D = 0.02$ мы получим верхний график для ошибки $\varepsilon(t)$ на рисунке 4, а значение максимальной мгновенной ошибки будет равно $\varepsilon_{\max} \approx 58$. Для случая $N_{\max} = 10\,000$ и $D = 0.0001$ мы получим аналогичный график внизу на рисунке 4 и значение ошибки $\varepsilon_{\max} \approx 580$.

Замечание 3. Относительная ошибка $\delta_{\max} = \varepsilon_{\max}/N_{\max}$ будет для модели (1)–(14) также величиной постоянной и не зависящей от выбора N_{\max} и D , при условии, что для параметров a , r_p и t_r используются одинаковые уравнения связи. Для обоих случаев из примера 2 значение относительной мгновенной ошибки не превосходит $\delta_{\max} = \varepsilon_{\max}/N_{\max} = 0.058$, а значит, модель (1)–(14) может быть использована⁸ для случая неоднородного распределения молекул на длительных временных интервалах. Фактически для данного примера модель (1)–(14) достигает пиковой ошибки в 0.58 %, что существенно меньше ошибки модели из работы [7] в 32 %.

⁸Следует отметить, что данный факт был установлен исключительно для уравнений связи, рассмотренных в примерах 1 и 2: $a \sim 5\sqrt{3D/2}$, $r_p \sim 0.01 \cdot a$ и $t_r = r_p^2/(2D)$.

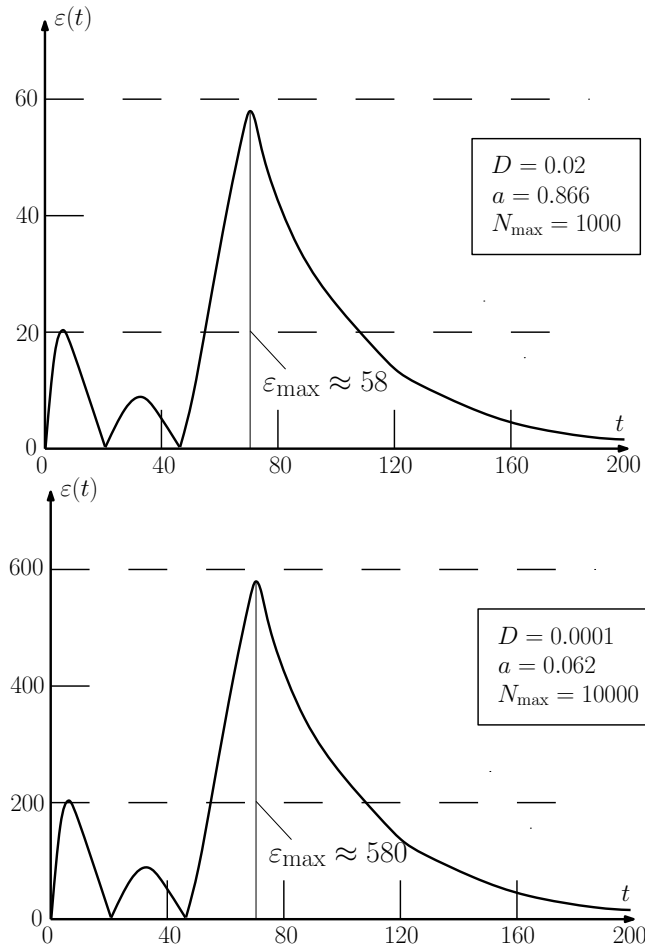


Рис. 4. Оценка ошибки свободного пробега модели (1)–(14) для примера 2

Заключение

Основными преимуществами модели (1)–(14) по сравнению с другими подходами для описания реакции-диффузии являются соответственно:

- возможность анализа динамики по первому приближению, если используются непрерывные аналоги функций Хевисайда, максимума и функции знака;

- значительный выигрыш по вычислительным затратам по сравнению с реализацией модели на основе частных производных.

Недостатками модели реакции-диффузии (1)–(14) являются соответственно:

- наличие нижнего предела для размеров элементарной ячейки a , что делает модель неприменимой для случая достаточно мелких ячеек;

- плохая интеграция с моделями, которые включают течение вещества в пространстве;

- существенно более низкая точность моделирования по сравнению с моделями на основе частных производных.

Для рассмотренной схемы можно также предложить аналог для описания теплообмена вместо диффузии. Пример такой схемы для случая более простого варианта модели представлен в работе [8]. Однако следует отметить, что в работе [8] была использована недостаточно строгая модель химической кинетики и поэтому для более точного описания динамики реакций рекомендуется использовать модель химической кинетики из статьи [9].

Перспективными задачами для модели реакции-диффузии (1)–(14) являются поиск эффективного способа интеграции с моделями, включающими ламинарное течение вещества, а также оценка ошибки модели от перекрытия граничных областей ячеек.

В заключение отметим, что модель (1)–(14) может быть использована не только для моделирования систем химической кинетики, но и для описания популяционной динамики, а также для моделирования многоклеточных организмов в биологии.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Шишкин Г.И., Шишкина Л.П. Улучшенная разностная схема метода декомпозиции решения для сингулярно возмущенного уравнения реакции-диффузии // Труды Института математики и механики УрО РАН. 2010. Т. 16. № 1. С. 255–271.
2. Макаров В.Л., Самарский А.А. Применение точных разностных схем к оценке скорости сходимости метода прямых // Журнал вычислительной математики и математической физики. 1980. Т. 20. Вып. 2. С. 371–387.
3. Гужев Д.С., Зайферт П., Калиткин Н.Н., Ширков П.Д. Численные методы решения задач химической кинетики с диффузией // Математическое моделирование. 1992. Т. 4. Вып. 1. С. 98–110.
4. Гурьева Я.Л., Ильин В.П. Вычислительные аспекты методов конечных объемов // Журнал вычислительной математики и математической физики. 1980. Т. 38. Вып. 11. С. 1860–1876.
5. Eymard R., Gallouet T., Herbin R. The finite volume method // Handbook of Numerical Analysis. 2000. Vol. 7. P. 713–1020.
6. Bussing T., Murman E. Finite-volume method for the calculation of compressible chemically reacting flows // AIAA Journal. 1988. Vol. 26. № 9. P. 1070–1078.
7. Назаров М.Н. Обобщение усредненных моделей с введением трехмерного пространства // Вестник Самарского государственного технического университета. Серия «Физико-математические науки». 2011. Вып. 4. С. 110–117.
8. Назаров М.Н. Об альтернативе уравнениям в частных производных при моделировании систем типа реакция-диффузия // Вестник Удмуртского университета. Математика. Механика. Компьютерные науки. 2013. Вып. 2. С. 35–47.
9. Nazarov M.N. New approaches to the analysis of the elementary reactions kinetics // Журнал Сибирского федерального университета. Серия «Математика и физика». 2014. Т. 7. Вып. 3. С. 373–382.

Поступила в редакцию 23.09.2014

Назаров Максим Николаевич, старший преподаватель, кафедра высшей математики 1, Национальный исследовательский университет «МИЭТ», 124498, Россия, Москва; Зеленоград, проезд 4806, д. 5.
E-mail: nazarov-maximilian@yandex.ru

M. N. Nazarov

A new approach to the reaction-diffusion systems modelling

Keywords: reaction-diffusion, alternative to partial derivatives, dynamic systems theory.

MSC: 35K57, 76R50

We consider a new technique for modelling the reaction-diffusion systems based on systems of ordinary differential equations. In contrary to the specialized numerical methods such as straight line method, this new technique is positioned at model level as a full alternative for partial differential equations. The description of this new method is quite similar to the description of finite volume method, except that it uses statistical simplifications and principles of geometric probability to describe diffusion processes. The main goal of this approach is to simplify the qualitative analysis of reaction-diffusion systems and to increase the efficiency of the numerical implementation. The first task is successfully resolved because of the fact that for the qualitative analysis of model dynamics based on ordinary differential equations it is possible to use the apparatus of the classical theory of dynamical systems. The second task is solved only partially, because the gain in efficiency while maintaining acceptable accuracy for numerical implementation will be considerable only for certain simple initial distribution of molecules, as well as for certain diffusion coefficients. To determine the criteria for practical application of this technique we also estimate the model error in general.

REFERENCES

1. Shishkin G.I., Shishkina L.P. Improved difference scheme of the solution decomposition method for a singularly perturbed reaction-diffusion equation, *Proceedings of the Steklov Institute of Mathematics*, 2011, vol. 272, no. 1, pp. 197–214.
2. Makarov V.L., Samarskii A.A. Use of exact difference schemes for estimating the rate of convergence of the method of straight lines, *USSR Computational Mathematics and Mathematical Physics*, 1980, vol. 20, no. 2, pp. 102–119.
3. Guzhev D.S., Seifert P., Kalitkin N.N., Shirkov P.D. Numerical methods for problems of chemical kinetics with diffusion, *Matem. Mod.*, 1992, vol. 4, no. 1, pp. 98–110 (in Russian).
4. Gur'eva Ya.L., Il'in V.P. Computational aspects of finite volume methods, *Computational Mathematics and Mathematical Physics*, 1998, vol. 38, no. 11, pp. 1783–1800.
5. Eymard R., Gallouet T., Herbin R. The finite volume method, *Handbook of Numerical Analysis*, 2000, vol. 7, pp. 713–1020.
6. Bussing T., Murman E. Finite-volume method for the calculation of compressible chemically reacting flows, *AIAA Journal*, 1998, vol. 26, no. 9, pp. 1070–1078.
7. Nazarov M.N. Generalization of coarse-grained models with introduction of three-dimensional space, *Vestn. Samar. Gos. Tekhn. Univ. Ser. Fiz.-Mat. Nauki*, 2011, no. 4, pp. 110–117 (in Russian).
8. Nazarov M.N. On alternative to partial differential equations for the modelling of reaction-diffusion systems, *Vestn. Udmurt. Univ. Mat. Mekh. Komp'yut. Nauki*, 2013, no. 2, pp. 35–47 (in Russian).
9. Nazarov M.N. New approaches to the analysis of the elementary reactions kinetics, *J. Sib. Fed. Univ. Math. Phys.*, 2014, vol. 7, no. 3, pp. 373–382.

Received 23.09.2014

Nazarov Maksim Nikolaevich, Senior Lecturer, National Research University of Electronic Technology, 4806 proezd, 5, Zelenograd, Moscow, 124498, Russia.
E-mail: nazarov-maximilian@yandex.ru