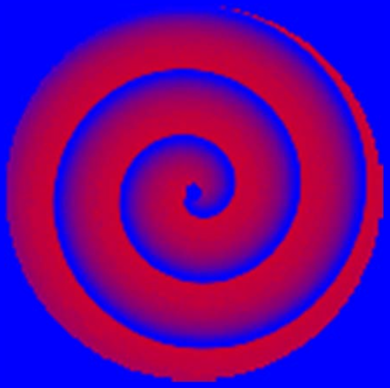
Г.Ю.Ризниченко

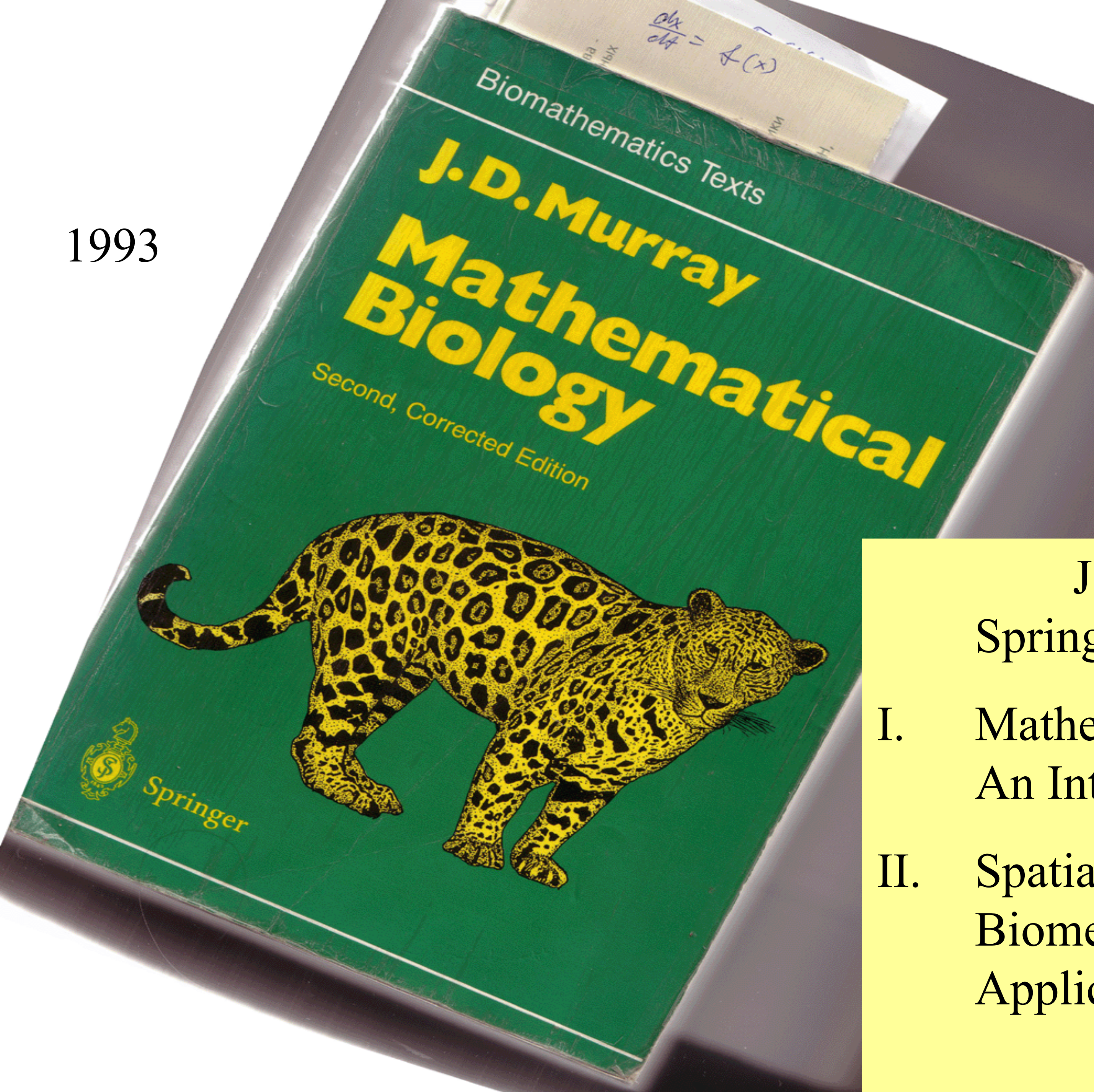


РАСПРЕДЕЛЕННЫЕ СИСТЕМЫ

Самоорганизация в пространстве:

- Нарушения симметрии при развитии эмбриона из яйцеклетки.
- Дифференцировка клеток и тканей.
- Возникновение органов. Раскраска шкур животных

1993

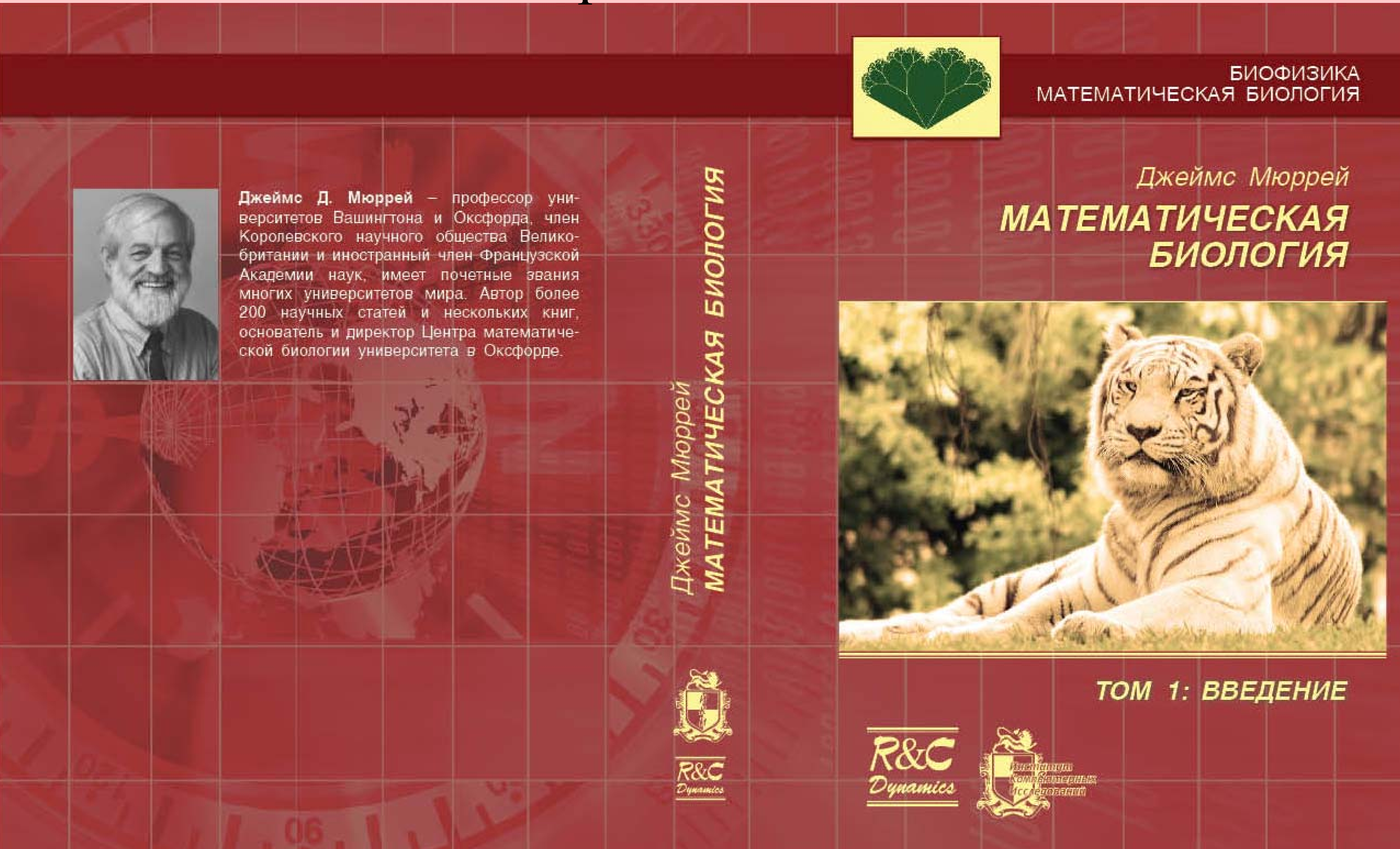


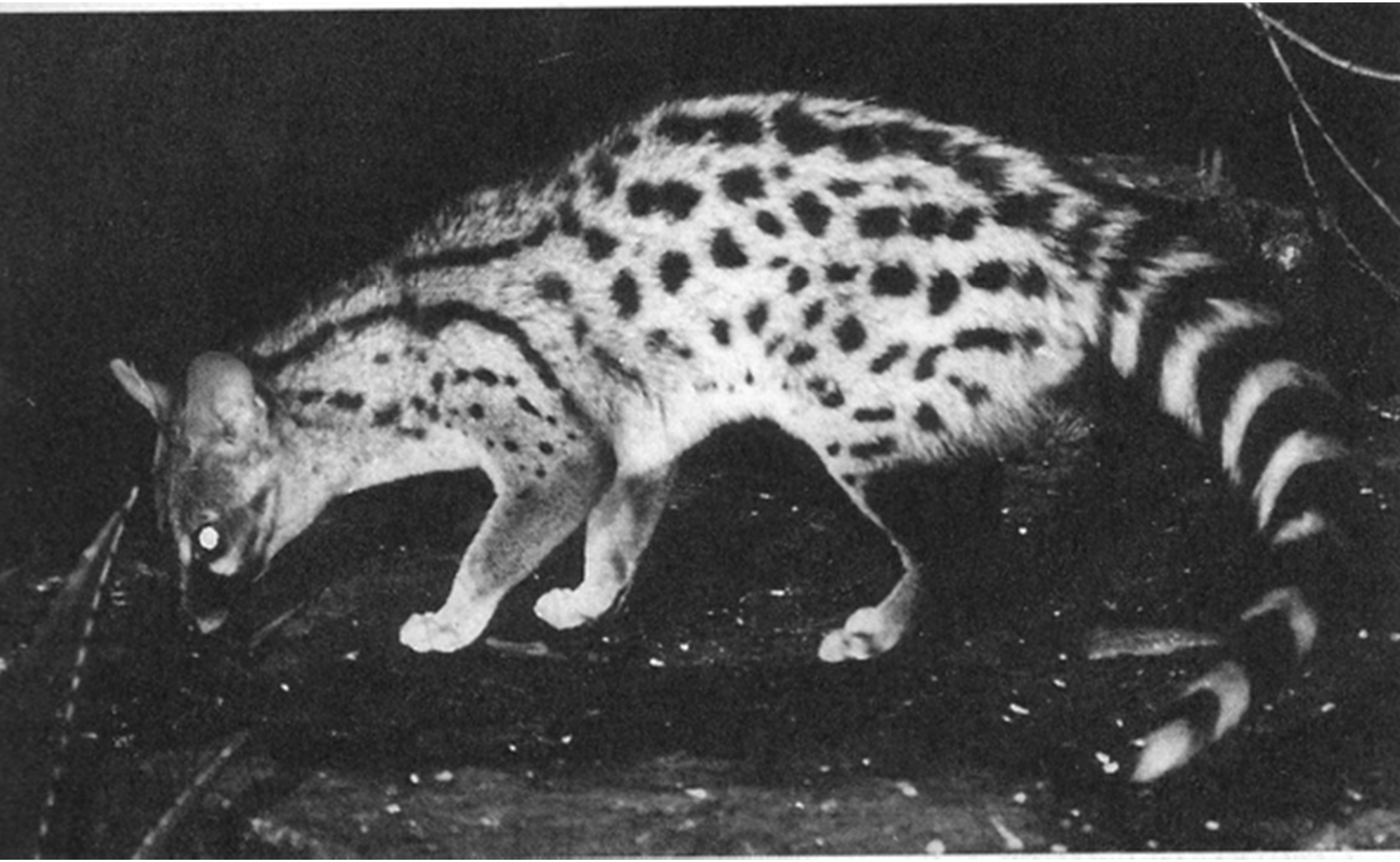
J.D.Murray. Springer

I. Mathematical biology. An Intriduction. 2003

II. Spatial models and Biomedical Applications. 2004

Перевод: Д.Мюррей 1. Введение, 2.Пространственные модели и биомедицинские приложения

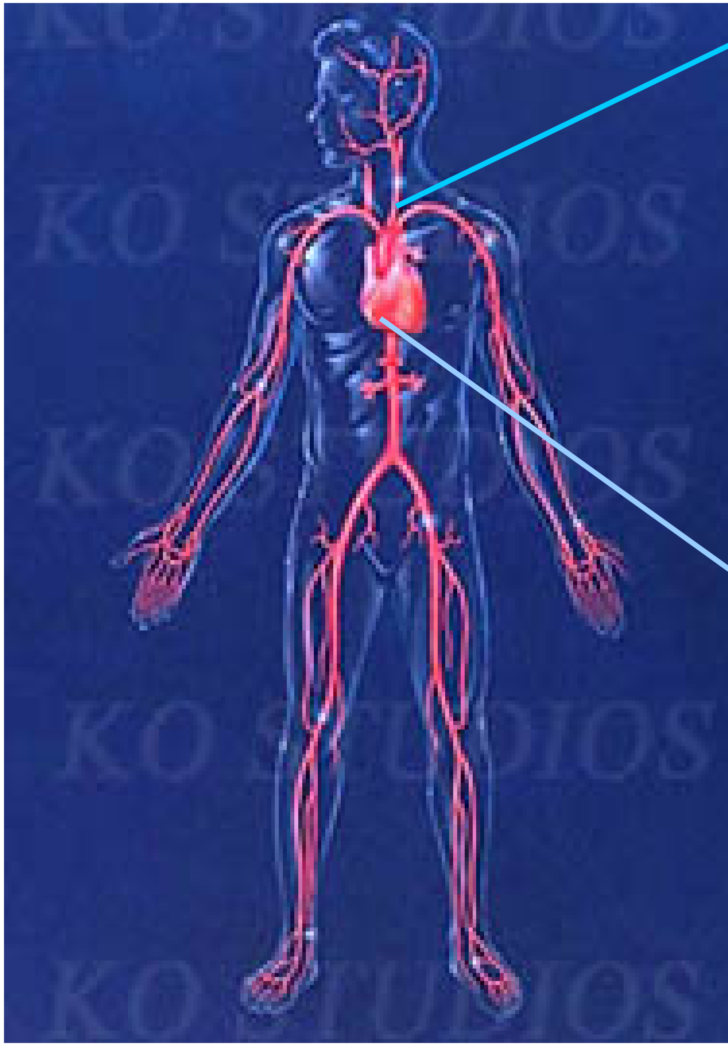


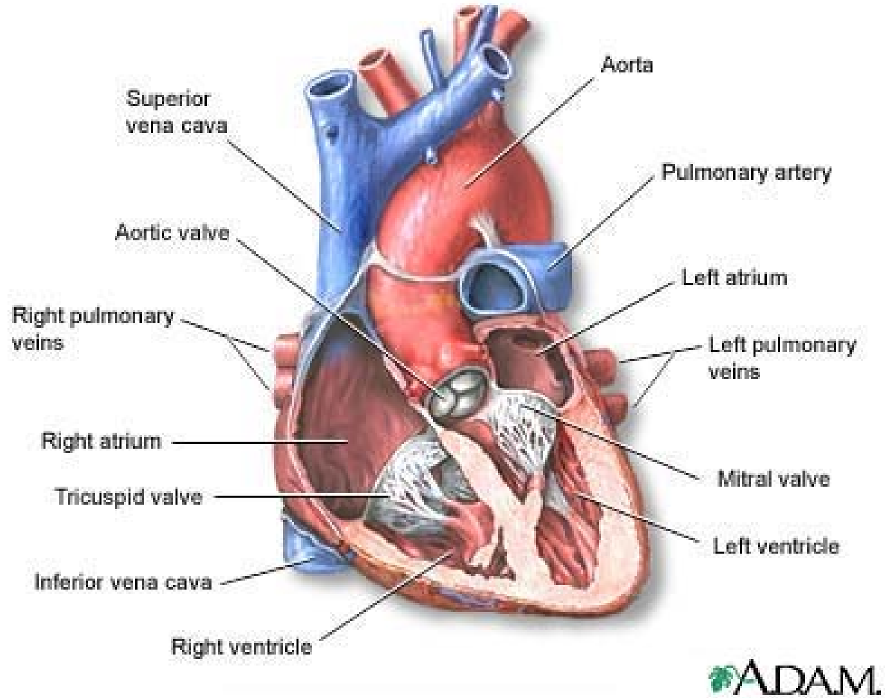


Распространение волн возбуждения

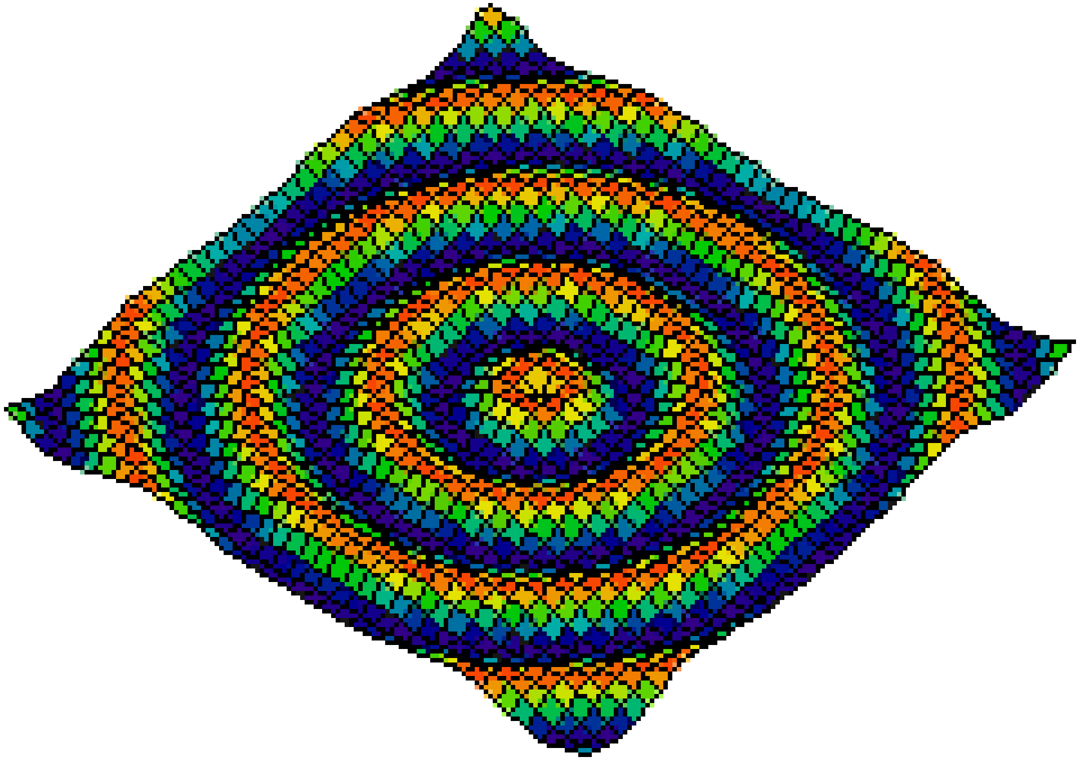
- Распространение нервного импульса
- Возбудимая ткань сердца
- Сокращение стенок сосудов (артерий)
- Сокращение стенок отделов желудочно-кишечного тракта
- Волны в мозгу

Строение сердца

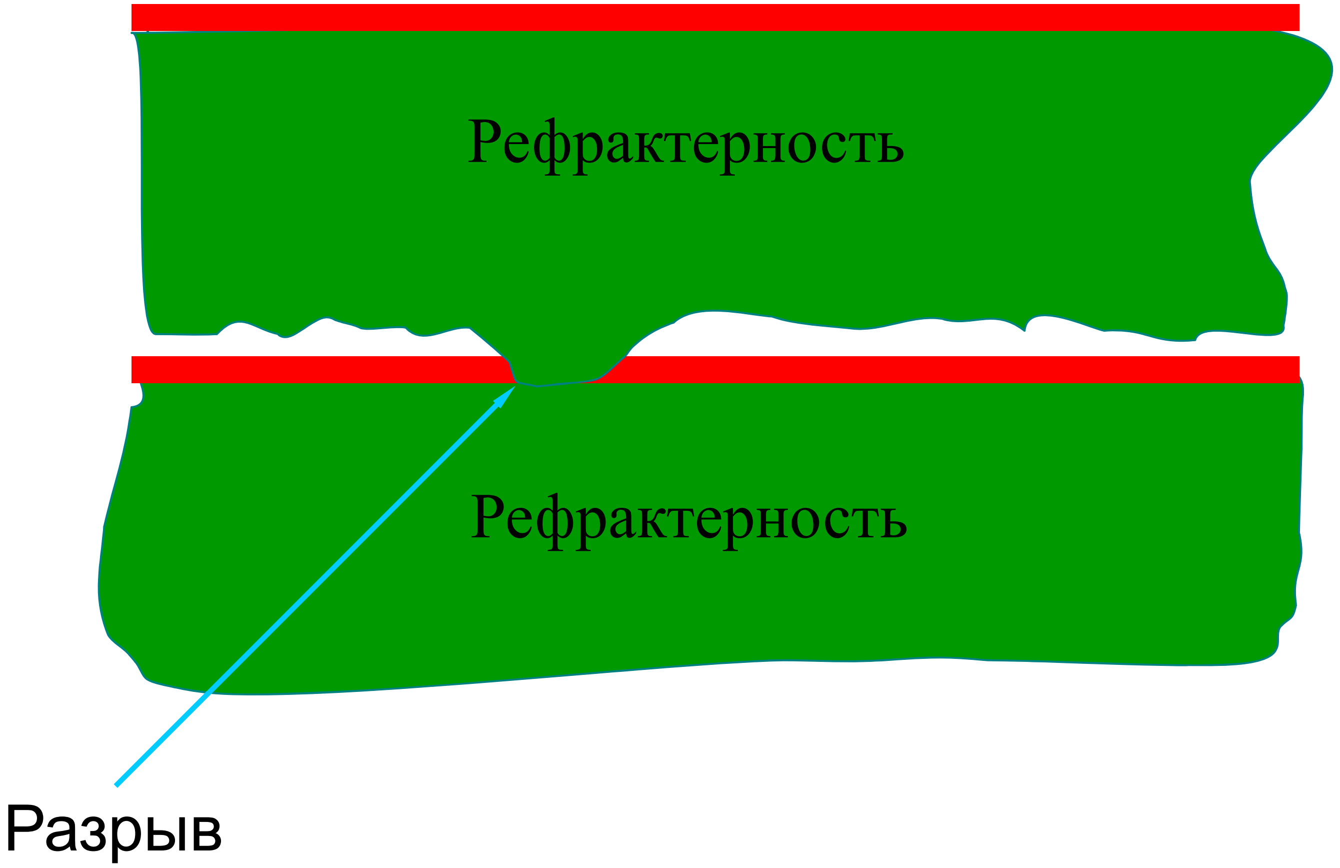




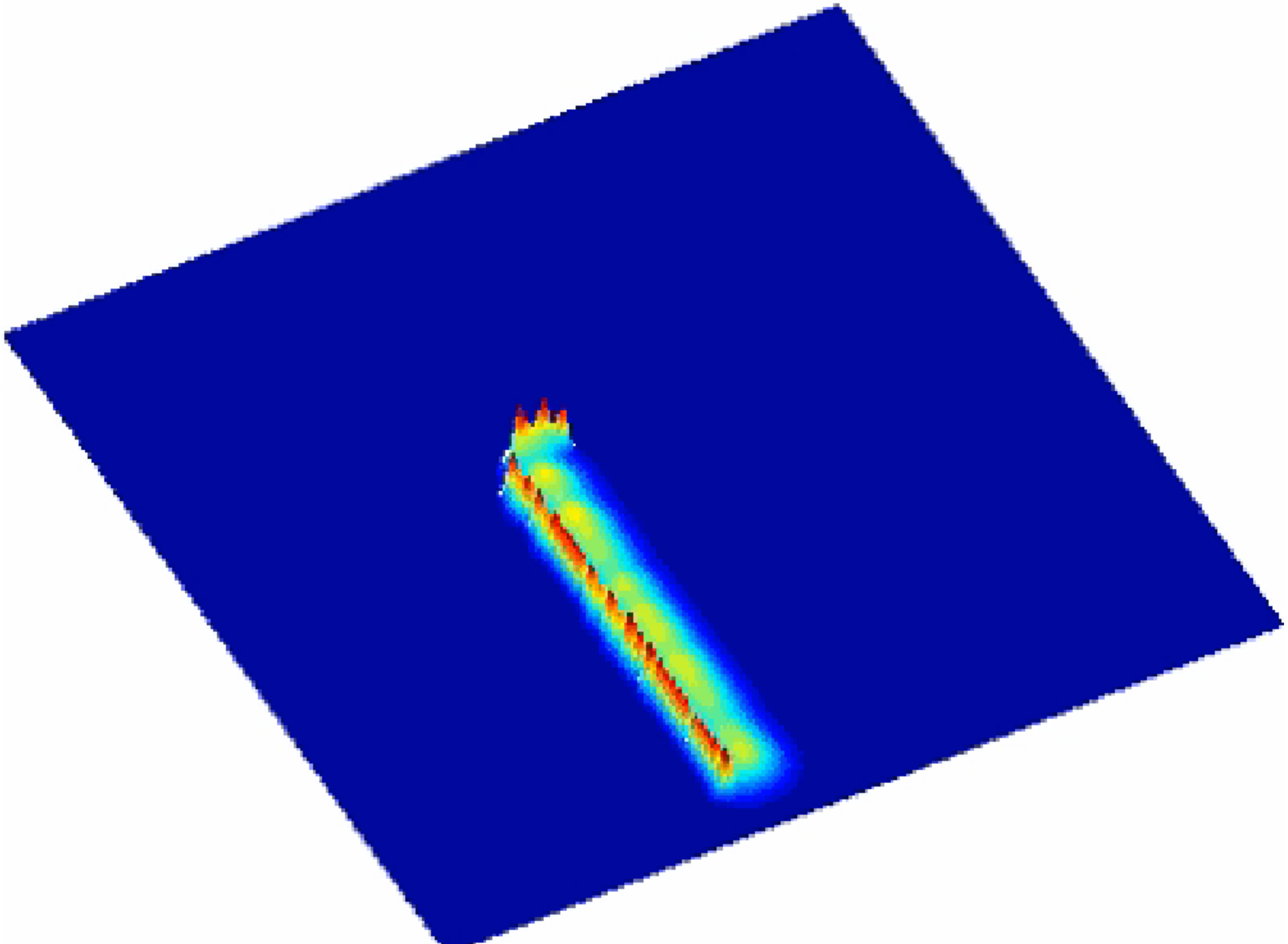
Волна возбуждения.
В середине – ведущий центр



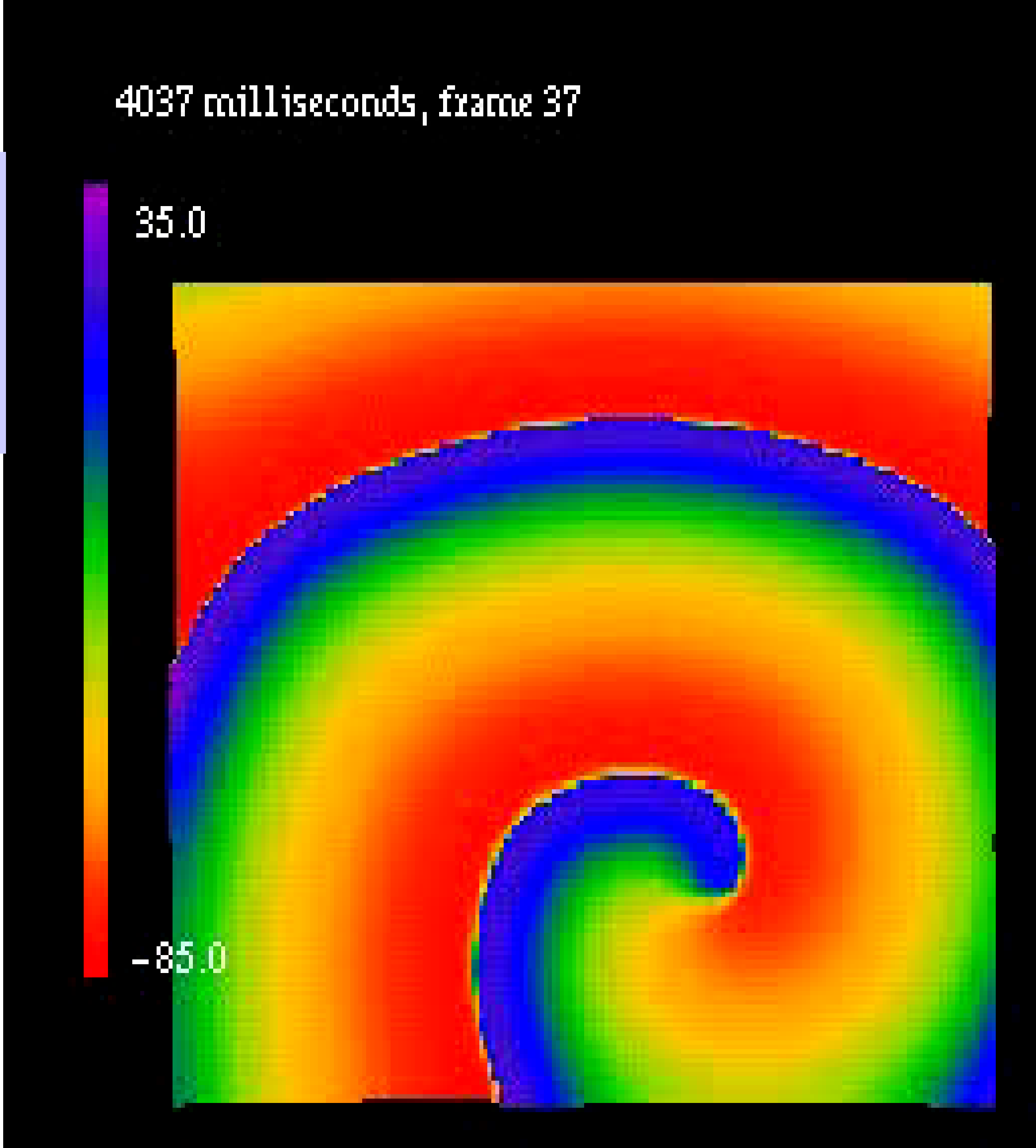
Разрыв волны возбуждения



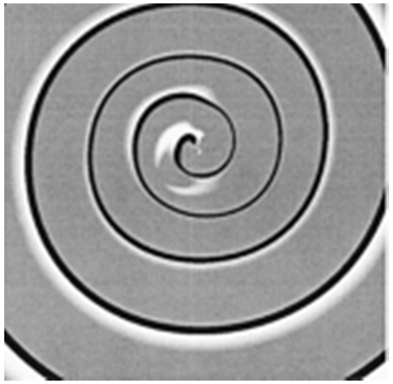
Разрыв фронта и возникновение спиральной волны



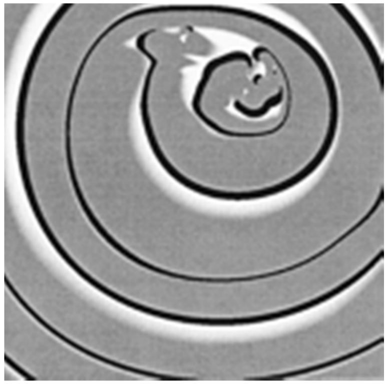
Спиральная волна



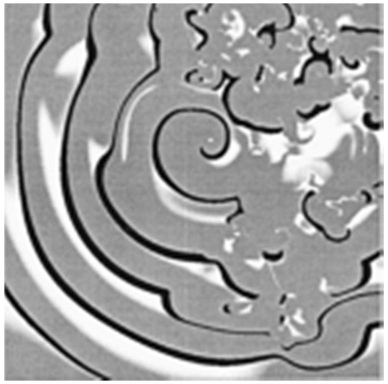
Рождение множества волн (т.е. *пространственно-временного хаоса*) – фибрилляция



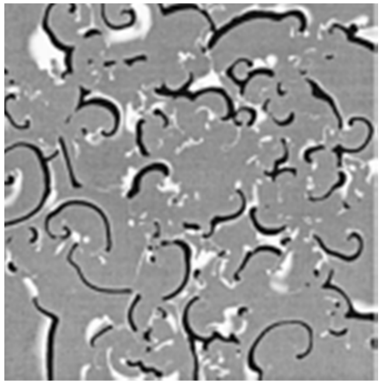
а. Исходная спиральная волна



б. Начало распада (в центре)



в. Увеличение области хаотического поведения



г. Конечная стадия распада спиральных волн

Процессы самоорганизации

описываются системами нелинейных дифференциальных уравнений в частных производных вида:

$$\frac{\partial x_i}{\partial t} = F_i\left(x_1, x_2, \ldots, x_n\right) + \frac{\partial}{\partial r}\left(\sum_{j=1}^{n} D_{ij}\frac{\partial x_j}{\partial r}\right),$$

$i = 1,2,\ldots, n$ Здесь D_i и D_{ij} $(i \neq j)$ - коэффициенты диффузии и взаимной диффузии, F_i - нелинейные функции, описывающие взаимодействие компонентов.

Активные среды

- а) существует распределенный источник энергии или веществ, богатых энергией;
- б) каждый элементарный объем среды находится в состоянии, далеком от термодинамического равновесия, т.е. является открытой термодинамической системой, в которой диссипирует часть энергии, поступающей из распределенного источника;
- в) связь между соседними элементарными объемами осуществляется за счет процессов переноса.

Типы пространственно-временного поведения в активных средах (1)

- Распространяющиеся возмущения в виде бегущего импульса.

- Генерация волн автономными источниками импульсной активности.

- В качестве источников волн могут выступать либо неоднородности среды, вызванные отклонением значений параметров системы из-за механических либо других повреждений, либо локальные кратковременные флуктуации переменных (источники типа "ведущий центр").

Стоячие волны.

Типы пространственно-временного поведения в активных средах (2)

- Синхронные автоколебания во всем пространстве. Синхронизация происходит с частотой того элемента пространства, который обладает наименьшим периодом колебаний.
- Квазистохастические волны, которые могут быть связаны с динамическим хаосом в локальной системе, но могут и возникать в распределенной системе с устойчивыми локальными элементами.
- Стационарные неоднородные распределения переменных в пространстве – диссипативные структуры.

Классические работы

- А.Н. Колмогоров, И.Г. Петровский, Н.С. Пискунов в работе “Исследование уравнения диффузии, соединенной с возрастанием вещества, и его применение к одной биологической проблеме” (Бюллетень МГУ, Серия А, Математика и механика, 1937, т.1; Вопросы кибернетики, вып.12, М.,1975, стр.3-30
- Аллан Тьюринг. Химические основы морфогенеза. 1952

  A.Turing. The chemical basis of morphogenesis. Phyl. Trans. Roy. Soc. (London) v.237, p. 37-72

$$\frac{\partial x_i}{\partial t} = F_i\ (x_1, x_2, ..., x_n) + \frac{\partial}{\partial r}\left(\sum_{j=1}^{n} D_{ij} \frac{\partial x_j}{\partial r}\right),$$

Уравнение диффузии. Закон Фика

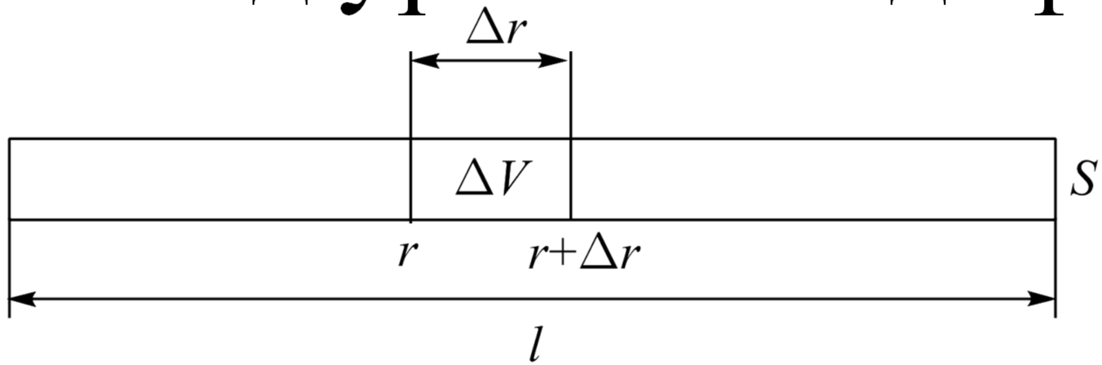
диффузионный поток какого-либо компонента, т.е. масса диффундирующего компонента, проходящая в единицу времени через единицу площади, перпендикулярной к направлению диффузии, пропорционален градиенту концентрации этого компонента, взятому с обратным знаком (закон Фика):

$$I = -D \frac{\partial C}{\partial r}.$$

Фик Адольф Ю́джин (Fick Adolf Eugen, 1829-1901) – немецкий физик и физиолог, сформулировал закон диффузии, изобретатель контактных линз.

$$\frac{\partial x_i}{\partial t} = F_i\left(x_1, x_2, \ldots, x_n\right) + \frac{\partial}{\partial r}\left(\sum_{j=1}^{n} D_{ij}\frac{\partial x_j}{\partial r}\right),$$

Вывод уравнения диффузии



$$\Delta M_r = -D\frac{\partial C(r,t)}{\partial r}S\Delta t \qquad \Delta M_{r+\Delta r} = -D\frac{\partial C(r+\Delta r,t)}{\partial r}S\Delta t$$

$$\Delta M = \Delta M_r - \Delta M_{r+\Delta r},$$

$$\Delta M = \left[D\frac{\partial C(r+\Delta r,t)}{\partial r} - D\frac{\partial C(r,t)}{\partial r}\right]S\Delta t.$$

$$\Delta C = \frac{\Delta M}{\Delta V} = \frac{\Delta M}{S\Delta r} = \frac{D\frac{\partial C(r+\Delta r,t)}{\partial r} - D\frac{\partial C(r,t)}{\partial r}}{\Delta r}\Delta t$$

$\Delta r \to 0$

$$\Delta C = \frac{\partial}{\partial r}\left(D\frac{\partial C(r,t)}{\partial r}\right)\Delta t$$

$\Delta t \to 0$

$$\frac{\partial C(r,t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial r}\left(D\frac{\partial C(r,t)}{\partial r}\right)$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D\frac{\partial^2 C}{\partial r^2} + F(r,t)$$

$F(r,t)$ – функция источника

Уравнения реакции-диффузии

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = f_i(C_1,\ C_2,\ldots C_n) + D_i\frac{\partial^2 C_i}{\partial r^2}$$

Начальные и граничные условия

Начальные и граничные (краевые) условия

Начальные условия

$C_i(t_0, r) = \varphi_i(r).$

Граничные условия

1 рода – заданы концентрации

$C(0, t) = \mu(t).$

2 рода – заданы потоки

$$\frac{\partial C}{\partial r}(0,t) = \nu(t)$$

$$I(0,t) = -D\frac{\partial C}{\partial r}(0,t)$$

$$\nu(t) = -\frac{I(0,t)}{D}$$

3 рода. На краю трубки задано линейное соотношение между производной и функцией

$$\frac{\partial C}{\partial r}(0,t) = -\lambda\left[C(0,t) - \theta(t)\right]$$

$I = h\,(C - \theta)$ и , $\quad I = -D\dfrac{\partial C}{\partial r}$

$\lambda = \dfrac{h}{D}$, $\qquad \theta$ – заданная функция.

В большом объеме граничные условия не влияют на малых временах. Все определяется начальным распределением веществ

Этапы решения краевой задачи для уравнения диффузии

Андрей
Николаевич
Тихонов
1906-1993

Александр
Андреевич
Самарский
1919-2008

$$C_t = DC_{rr} + f(r, t)$$

$$C(r,0) = \varphi(r)$$

$$C(0, t) = \mu_1(\mathrm{t}); \quad C(l, t) = \mu_2(\mathrm{t})$$

1. Решение однородного уравнения с нулевыми граничными условиями $C(0, t) = 0$; $C(l, t) = 0$.

 и заданным начальным условием $C(r,0) = \varphi(r)$.

Уравнения Математической физики

2. Решение неоднородного уравнения с нулевыми граничными условиями

3. Решение неоднородного уравнения с заданными граничными условиями

Решение однородного уравнения Метод разделения переменных

$$C_t = DC_{rr} + f(r, t)$$

Начальное условие: $C(r, 0) = \varphi(r)$.

нулевые краевые условия: $C(0, t) = 0$; $C(l, t) = 0$

Ищем решение в виде: $C(r, t) = R(r)T(t)$.

$R(r)$ – функция только пространственной переменной r,
$T(t)$ – функция только переменной времени t.

Метод разделения переменных

$$T'R = DTR''$$

$$C_t = DC_{rr} + f(r,\ t)$$

$$\frac{1}{D}\frac{T'}{T} = \frac{R''}{R} = -\lambda$$

$$C_t = DC_{rr}$$

$$R''(r) + \lambda R(r) = 0,$$

Уравнения для R

$$T'(t) + D\lambda T(t) = 0.$$

Уравнение для T

Уравнение для R
Задача Штурма-Лиувилля о собственных значениях и собственных функциях

$$R''(r) + \lambda R(r) = 0,$$

Граничные условия: $R(0) = R(l) = 0,$

$$R(r) = C_1 e^{\sqrt{-\lambda} r} + C_2 e^{-\sqrt{-\lambda} r}$$

При $\lambda \le 0$ задача не имеет нетривиальных решений.
При $\lambda > 0$ общее решение (14.10) содержит мнимые показатели и поэтому может быть записано в виде

$$R(r) = D_1 \cos\sqrt{\lambda} r + D_2 \sin\sqrt{\lambda} r$$

Краевые условия (14.9) дают:
$R(0) = D_1 = 0,$

$$R(l) = D_2 \sin\sqrt{\lambda} l = 0$$

$$\sin\sqrt{\lambda} l = 0 \qquad \sqrt{\lambda} = \frac{\pi n}{l}$$

n – целое число

Собственные значения и собственные функции

$$R(l) = D_2 \sin\sqrt{\lambda} l = 0$$

k= $\sqrt{\lambda_n} = \dfrac{\pi n}{l}$ Волновое число

Таким образом, нетривиальные решения задачи возможны лишь при значениях

$$\lambda_n = \left(\frac{\pi n}{l}\right)^2$$ Собственные значения

$$R_n(r) = D_n \sin\frac{n\pi}{l} r$$ Собственные функции

Уравнение для T:

$$T'(t) + D\lambda T(t) = 0$$

$$C_t = DC_{rr}$$

$$C(r,\ t) = R(r)T(t).$$

Для каждого n:

$$T_n(t) = A_n e^{-D\lambda_n t}$$

$$\lambda_n = \left(\frac{\pi n}{l}\right)^2$$

$$C_n(r,t) = R_n(r)\cdot T_n(t) = A_n e^{-D\lambda_n t} \sin\frac{\pi n}{l} r$$

$k_n = \dfrac{\pi n}{l}$ является «частотой колебания» переменной C в пространстве

$$\Lambda_n = \frac{2\pi}{k_n}$$

Длина волны n-й гармоники

$$e^{-\left(\frac{\pi n}{l}\right)^2 Dt}$$

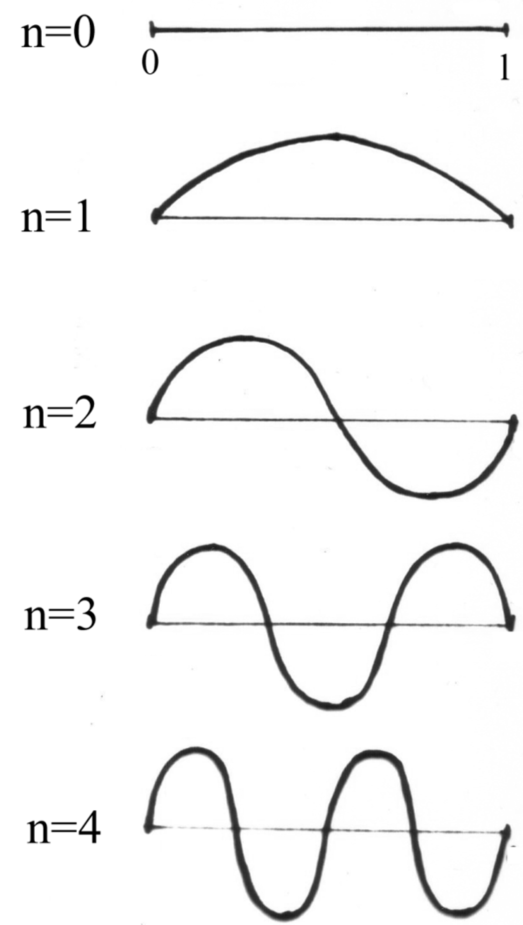
Коэффициент затухания

Линейное уравнение диффузии с нулевыми граничными условиями

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D\frac{\partial^2 c}{\partial r^2}$$

$$C(r,t) = \sum_{n=1}^{\infty} A_n e^{-\left(\frac{\pi n}{l}\right)^2 Dt} \sin\frac{\pi n}{l} r$$

$$C(r,t) = \sum_{=1}^{\infty} A_n e^{p_n t} e^{ik_n r}$$



Собственные функции

Учет начальных условий

$$C_t = DC_{rr}$$

Начальное условие: $C(r,\ 0) = \varphi(r)$.

$$\varphi(r) = C(r,0) = \sum_{n=1}^{\infty} A_n \sin\frac{\pi n}{l} r$$

A_n представляют собой коэффициенты *разложения Фурье* функции $\varphi(r)$ по синусам в интервале $(0,\ l)$:

$$A_n = \varphi_n = \frac{2}{l}\int_0^l \varphi(\xi)\sin\frac{\pi n}{l}\xi\, d\xi$$

$$C(r,t) = \int_0^l \left[\frac{2}{l}\sum_{n=1}^{\infty} e^{-\left(\frac{\pi n}{l}\right)^2 Dt} \sin\frac{\pi n}{l} r \cdot \sin\frac{\pi n}{l}\xi\right]\varphi(\xi)\, d\xi$$

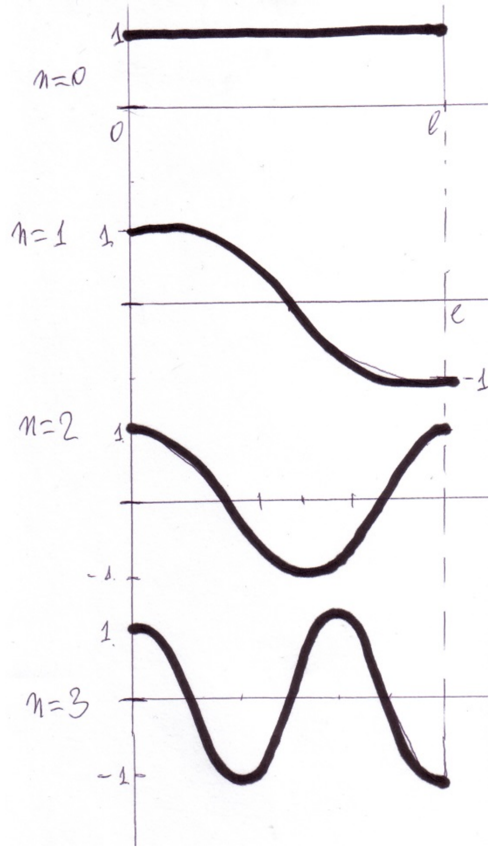
Функция мгновенного источника

$$G(r,\xi,t)=\frac{2}{l}\sum_{n=1}^{\infty}e^{-\left(\frac{\pi n}{l}\right)^{2}Dt}\sin\frac{\pi n}{l}r\cdot\sin\frac{\pi n}{l}\xi$$

характеризует распределение вещества в трубке $0 \le r \le l$ в момент времени t, если в начальный момент времени концентрация вещества равна нулю, и в этот момент в точке $r = \xi$ мгновенно выделяется некоторое количество вещества, а концентрация вещества на концах трубки все время поддерживается нулевой.

$$C(r,t)=\int_{0}^{l}G(r,t,\xi)\varphi(\xi)d\xi$$

Нулевые потоки на границах
замкнутая система



Собственные функции

$$R_n = D_n \cos\frac{\pi n}{l} r$$

$$C(r,t) = \int_0^l \left[\frac{2}{l} \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\left(\frac{\pi n}{l}\right)^2 Dt} \cos\frac{\pi n}{l} r \cdot \cos\frac{\pi n}{l} \xi \right] \varphi(\xi) d\xi,$$

Решение задачи с источниками (стоками)

$$C_t = DC_{rr} + f(r,\ t)$$

Ищут решение с нулевым начальным и нулевыми краевыми условиями

Ищут решение в виде $$C(r,t) = \sum_{n=1}^{\infty} C_n(t) \sin\frac{\pi n}{l} r.$$

$$f(r,t) = \sum_{n=1}^{\infty} f_n(t) \sin\frac{\pi n}{l} r$$ разлагают в ряд Фурье

решение: $$C(r,t) = \sum_{n=1}^{\infty} \left[\int_0^t e^{-\left(\frac{\pi n}{l}\right)^2 D(t-\tau)} f_n(\tau) d\tau \right] \sin\frac{\pi n}{l} r.$$

Общее решение краевой задачи

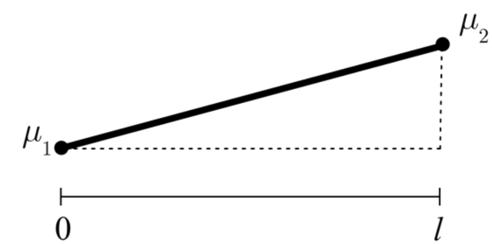
$$C_t = DC_{rr} + f(r,\ t)$$

$$C(r,0) = \varphi(r)$$

$$C(0,\ t) = \mu_1(\mathrm{t});\quad C(l,\ t) = \mu_2(\mathrm{t})$$

$$C(r,\ t) = V(r,\ t) + v(r,\ t).$$

$$V(r,t) = \mu_1(t) + \frac{r}{l}\left[\mu_2(t) - \mu_1(t)\right]$$



$$v_t = Dv_{rr} + \overline{f}(r,t)$$

$$\overline{f}(r,t) = f(r,t) - \left[V_t - DV_{rr}\right]$$

Начальные условия: $v(r,0) = \overline{\varphi}(r)$ $\quad \overline{\varphi}(r) = \varphi(r) - V(r,0)$

Граничные условия – нулевые: $\overline{\mu}_1(t) = 0 \quad \overline{\mu}_2(t) = 0$

Устойчивость гомогенного стационарного состояния

Устойчивость гомогенного стационарного состояния для одного уравнения в одномерном реакторе

(трубке длины *l*)

$$\frac{\partial C}{\partial t} = f(C) + D\frac{\partial^2 C}{\partial r^2}.$$

Краевые условия – непроницаемость границ

$$\frac{\partial C}{\partial t}(t,0) = \frac{\partial C}{\partial r}(t,l) = 0.$$

Гомогенное стационарное состояние:

$$f(C_0) = 0$$

Устойчивость – зададим малые отклонения

$$\frac{\partial C}{\partial t} = f(C) + D\frac{\partial^2 C}{\partial r^2}.$$

Зададим системе некоторое возмущение $\delta(r)$, *т.е. выберем в качестве начальной функции в этой задаче функцию, близкую к* C_0:

$$C(0,r) = C_0 + \delta(r);$$

$$|\delta(r)| << 1$$

Малое отклонение

Пусть $C_\delta(t, r)$ – *решение задачи с такой начальной функцией.*

При малых $\delta(r)$ *функция* $C_\delta(t,r)$ *может быть представлена в виде:*

$$C_\delta(t, r) \approx C_0(r) + \delta(t, r).$$

Вблизи $C_0(r)$ нелинейную функцию $f(C)$ можно приблизить линейной функцией, использовав первый член разложения по C в ряду Тейлора:

$$f(C) = f(C_0) + f_c'(C_0)(C - C_0)$$

$$C - C_0 = \delta(t,r)$$

Уравнение для отклонения

$$\frac{\partial C}{\partial t} = f(C) + D\frac{\partial^2 C}{\partial r^2}.$$

$C_\delta(t, r) \approx C_0 + \delta(t, r).$

$|\delta(r)| << 1$

$$\frac{\partial C_0}{\partial t} + \frac{\partial \delta(t,r)}{\partial t} = f(C_0) + f_c'(C_0)\delta(t,r) + D\frac{\partial^2 C_0}{\partial r^2} + D\frac{\partial^2 \delta(t,r)}{\partial r^2}$$

Учитывая, что C_0 – гомогенное стационарное состояние, остается уравнение для отклонений

$$\frac{\partial \delta(t,r)}{\partial t} = \frac{\partial^2 \delta(t,r)}{\partial r^2} + f_c'(C_0)\delta(t,r)$$

Здесь D=1

с начальным условием $\delta(0, r) = \delta(r)$ и краевыми условиями:

$$\frac{\partial \delta(t,0)}{\partial r} = \frac{\partial \delta(t,l)}{\partial r} = 0$$

Решение линеаризованной задачи

$$\frac{\partial \delta(t,r)}{\partial t} = \frac{\partial^2 \delta(t,r)}{\partial r^2} + f_c'(C_0)\delta(t,r)$$

$$f_c'(C_0) = A = const$$

$$\frac{\partial \delta(t,r)}{\partial t} = \frac{\partial^2 \delta(t,r)}{\partial r^2} + A \cdot \delta(t,r)$$

Решение ищем в виде

$$\delta(t,r) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k(t) \cos\frac{k\pi r}{l}$$

Для каждого *k* получим уравнение:

$$\frac{\partial a_k(t)}{\partial t} \cos\frac{k\pi r}{l} = -\frac{k^2\pi^2}{l^2} a_k(t) \cos\frac{k\pi r}{l} + A a_k(t) \cos\frac{k\pi r}{l}$$

Уравнение для отклонений во времени

$$\frac{\partial a_k(t)}{\partial t} = \left(-\frac{k^2\pi^2}{l^2} + A \right) a_k(t)$$

$a_k(0) = 1$

$$a_k(t) = \exp\left\{ \left(-\frac{k^2\pi^2}{l^2} + A \right) t \right\}$$

Решение неустойчиво, если

$$\frac{k^2\pi^2}{l^2} < A = f'(C_0)$$

Нарастают гармоники (моды) для которых

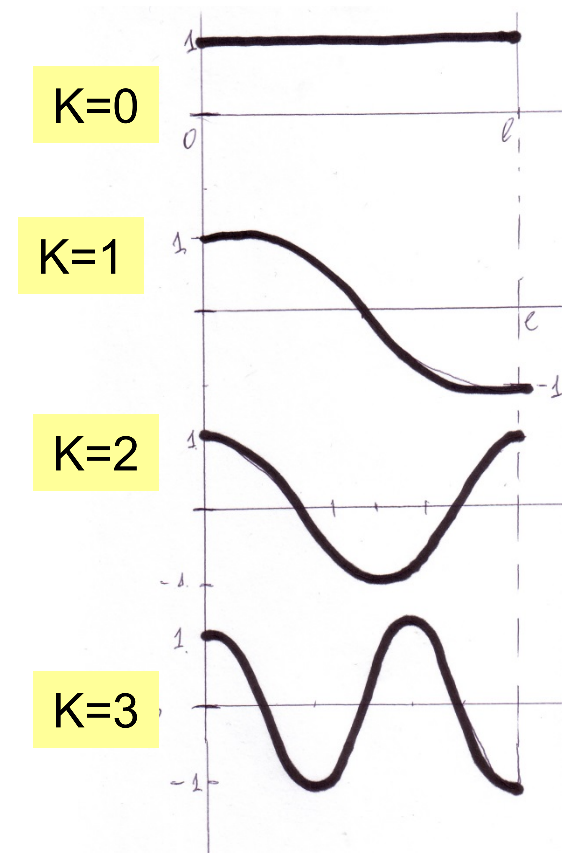
$$k^* < \sqrt{\frac{f'(C_0)l^2}{D\pi^2}}$$

Система усиливает вклады низших гармоник (мод)

$$\delta(t,r) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k(t) \cos \frac{k\pi r}{l}$$

$$k^* < \sqrt{\frac{f'(C_0)l^2}{D\pi^2}}$$

Номер наивысшей незатухающей гармоники тем больше, чем длиннее реактор и тем меньше, чем выше значение коэффициента диффузии.



Незатухающие гармоники, развиваясь, могут приводить систему к установлению пространственно неоднородных диссипативных структур или автоволновых режимов.

Два уравнения реакция-диффузия

$$\frac{\partial x}{\partial t} = P(x, y) + D_x \frac{\partial^2 x}{\partial r^2}$$

$$\frac{\partial y}{\partial t} = Q(x, y) + D_y \frac{\partial^2 y}{\partial r^2}$$

Линеаризованные уравнения

$$\frac{\partial \xi}{\partial t} = a\xi + b\eta + D_\xi \frac{\partial^2 \xi}{\partial r^2} \quad a=\frac{\partial P(\bar{x},\bar{y})}{\partial x}, \quad b=\frac{\partial P(\bar{x},\bar{y})}{\partial y}$$

$$c=\frac{\partial Q(\bar{x},\bar{y})}{\partial x}, \quad d=\frac{\partial P(\bar{x},\bar{y})}{\partial y}$$

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} = c\xi + d\eta + D_\eta \frac{\partial^2 \eta}{\partial r^2}$$

Решение линейной системы ищем в виде:

$$\xi(t,r) = Ae^{pt}e^{ikr},$$

$$\eta(t,r) = Be^{pt}e^{ikr}$$

k – волновое число, «частота» по пространству

Уравнения для амплитуд

$$A(p - a + D_{\xi} k^2) - bB = 0$$

$$cA - (p - d + D_{\eta} k^2)B = 0$$

Дисперсионное уравнение

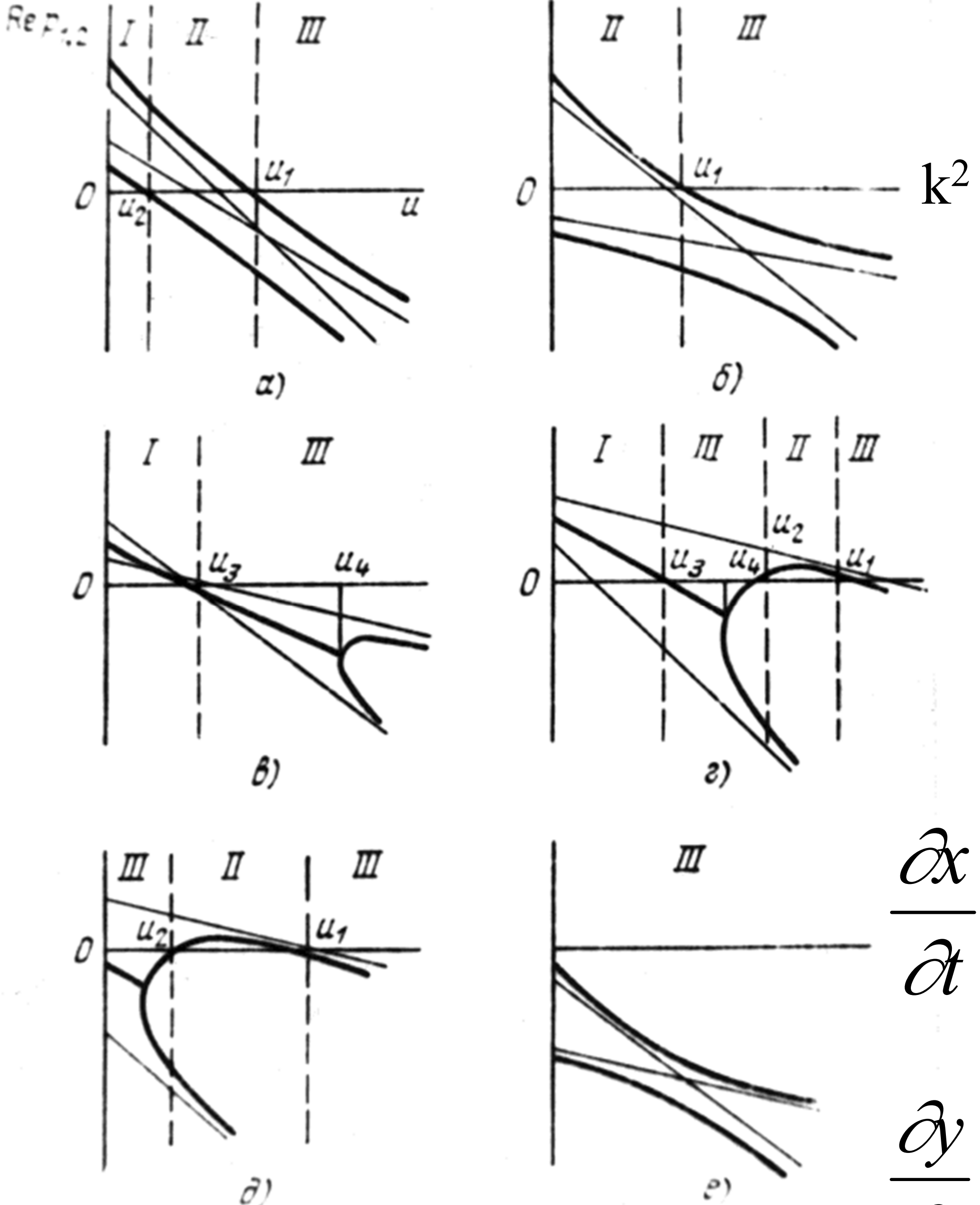
$$(p - a + k^2 D_\xi)(p - d + k^2 D_\eta) - bc = 0$$

$$p_{1,2} = \frac{a + d - (D_\xi - D_\eta)k^2 \pm \sqrt{[a - d - k^2(D_\xi - D_\eta)]^2 + 4bc}}{2}$$

Отсюда ищем *p*- знак действительной части которого определяет устойчивость

$$\xi(t,r) = Ae^{pt}e^{ikr},$$

$$\eta(t,r) = Be^{pt}e^{ikr}$$

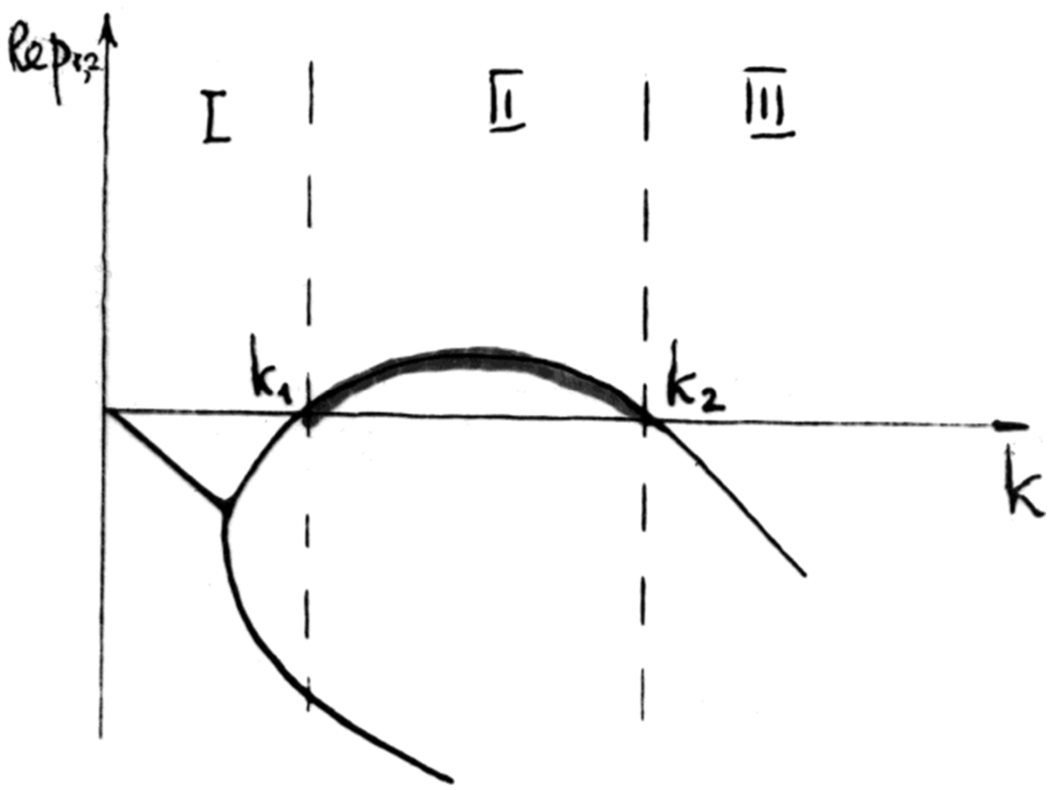


Зависимость реальной части собственных чисел от волнового числа для системы двух уравнений с диффузией

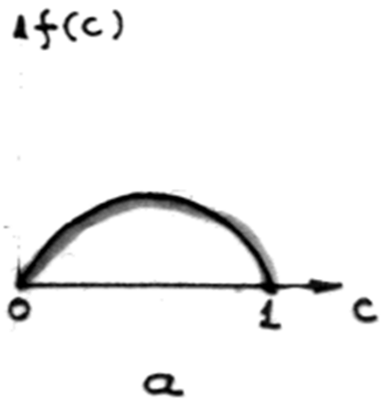
$$\frac{\partial x}{\partial t} = P(x, y, r) + D_x \frac{\partial^2 x}{\partial r^2}$$

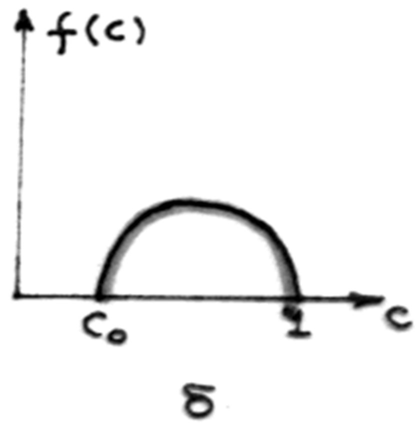
$$\frac{\partial y}{\partial t} = Q(x, y, r) + D_y \frac{\partial^2 y}{\partial r^2}$$

Зависимость реальной части собственных чисел от волнового числа для системы двух уравнений с диффузией. Неустойчивость Тьюринга



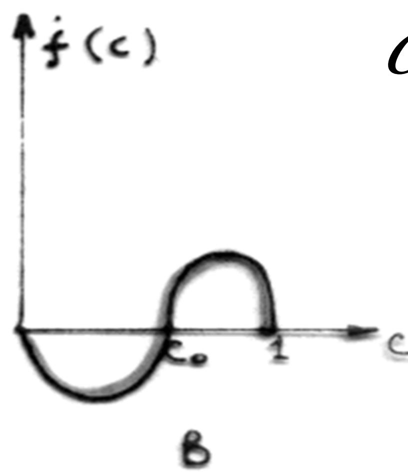
Модель распространения волны Петровского-Колмогорова- Пискунова





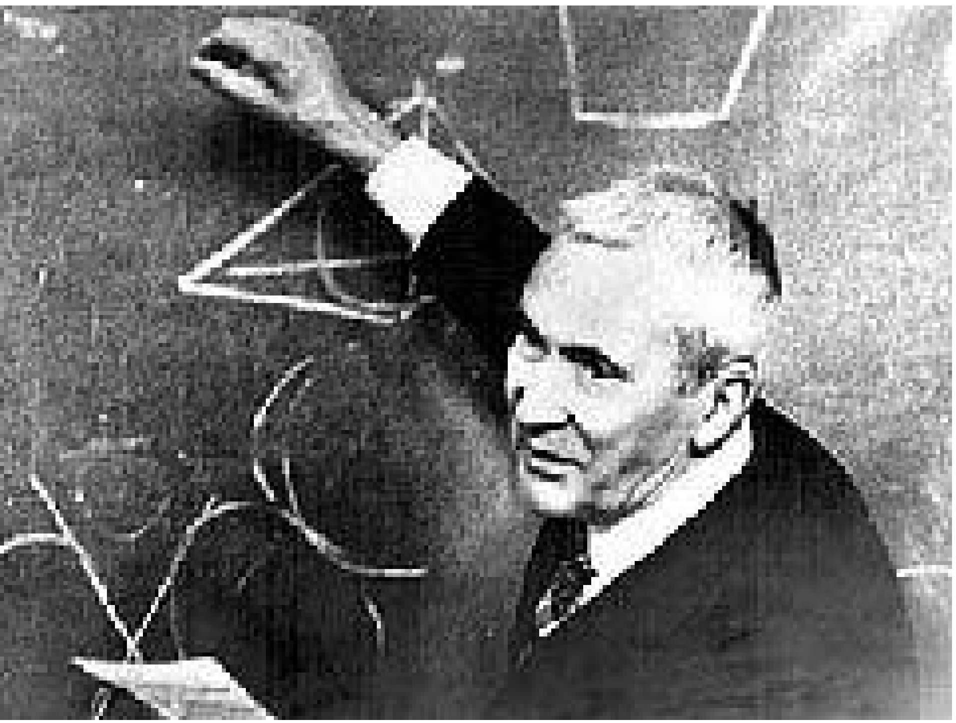
$$\frac{\partial c}{\partial t} = D\frac{\partial^2 C}{\partial r^2} + f(C)$$

Функции правой части



Модель распространения доминирующего вида

Андрей Николаевич Колмогоров

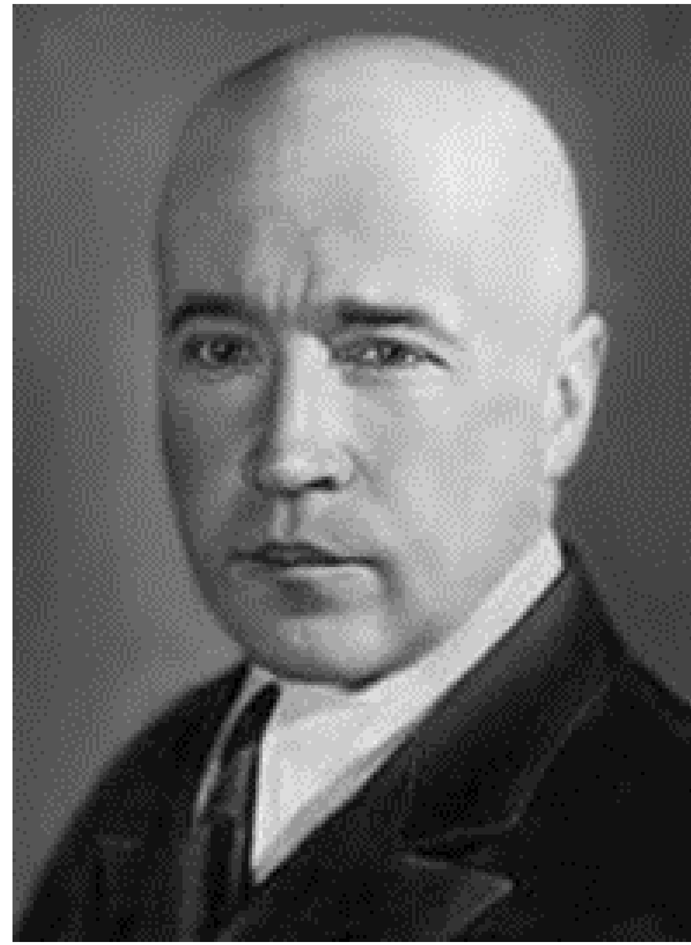


Человечество всегда мне представлялось в виде множества блуждающих в тумане огоньков, которые лишь смутно чувствуют сияние, рассеиваемое всеми другими, но связаны сетью ясных огненных нитей, каждый в одном, двух, трех... направлениях. И возникновение таких прорывов через туман к другому огоньку вполне разумно называть "ЧУДОМ".

Андрей Николаевич Колмогоров занимает уникальное место в современной математике, и в мировой науке в целом. По широте и разнообразию своих научных занятий он напоминает классиков естествознания прошлых веков

Ива́н Гео́ргиевич Петро́вский

1901-1973



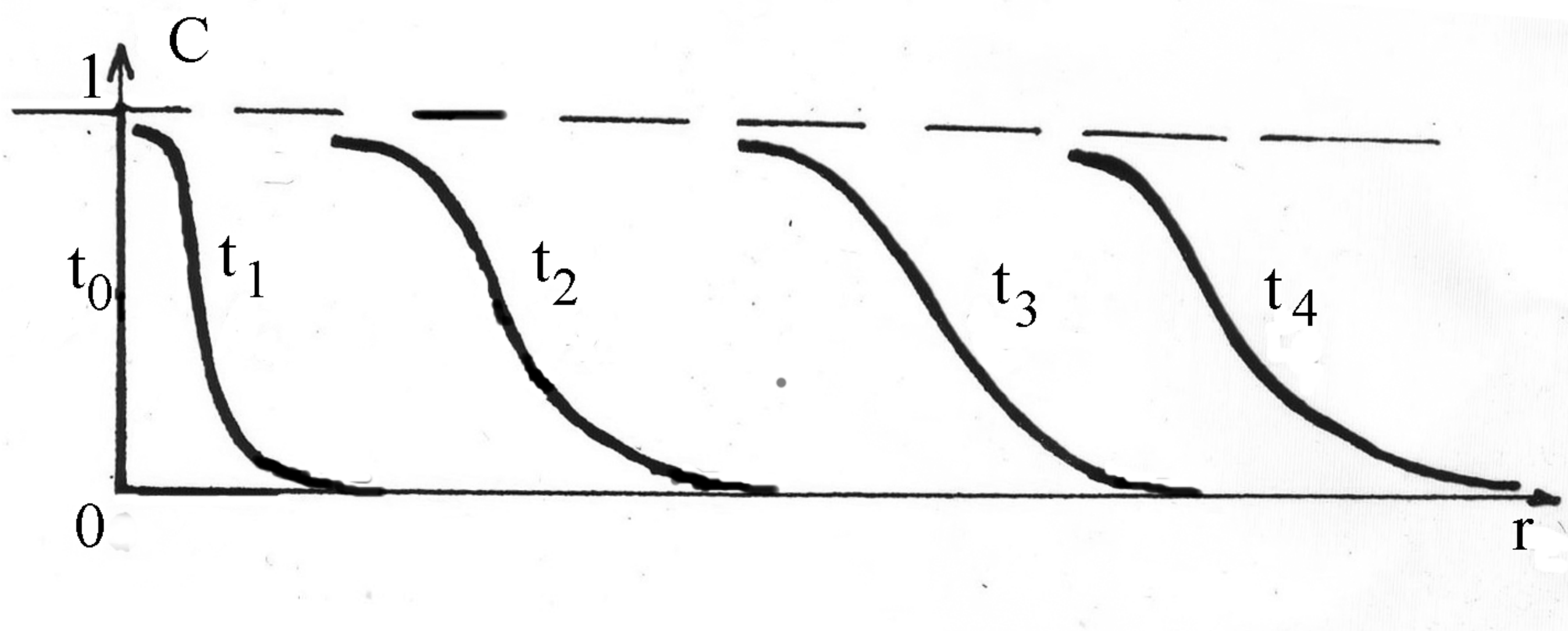
выдающийся советский математик и деятель отечественного образования. С 1951 по 1973 гг. — ректор Московского государственного университета им. М.В.Ломоносова

Профиль распространяющейся волны в разные моменты времени в уравнении Петровского-Колмогорова-Пискунова

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

Предельная скорость распространения фронта волны

$$\lambda_0 = 2\sqrt{D \cdot f'(0)}$$



Автоволновое решение $\frac{\partial c}{\partial t} = D\frac{\partial^2 C}{\partial r^2} + f(C)$

- Предельная форма кривой плотности дается решением уравнения:

$$D\frac{d^2V}{dz^2} + \lambda_0 \frac{dV}{dz} + f(V) = 0,$$

- обращающимся в нуль при $Z = +\infty$ и в единицу при $Z = -\infty$.
- Такое решение $V(Z)$ всегда существует и единственно, с точностью до преобразования (A – произвольная постоянная), не меняющего форму кривой.
- Уравнение может быть получено, если искать решение уравнения распространения волны в форме:
- $C(t,r) \approx V(r - \lambda t)$