
Глава 6

Уравнения реакция–диффузия. Окраска шкур животных

Все рассмотренные выше примеры относились к случаю, когда изучаемый процесс описывается при помощи одной функции. На практике часто встречаются задачи, в которых для описания процесса требуется несколько неизвестных функций, например, многокомпонентные смеси (неизвестные функции — концентрация $c_k(x, y, t)$, $k = 1, 2, \dots$); уравнения Навье–Стокса (неизвестные функции — компоненты скорости и давление); уравнения тепловой гравитационной конвекции (неизвестные функции — компоненты скорости, давление и температура) и т. п.

Схема построения алгоритма на языке FreeFem++ для решения задач с многими неизвестными функциями мало отличается от случая одной неизвестной функции. Основная особенность, на которую следует обратить внимание, хотя она и достаточно очевидна — это запись слабой (вариационной) формулировки задачи в виде *одного* соотношения для всех неизвестных функций, а не для каждой функции в отдельности.

Проще всего продемонстрировать алгоритм построения решения на примере нестационарных уравнений реакции–диффузии.

6.1 Постановка задачи

Пусть дана система уравнений для определения двух неизвестных функций $s(x, y, t)$ и $a(x, y, t)$

$$\begin{aligned} s_t - \mu_s \Delta s &= g(s, a, x, y, t), \\ a_t - \mu_a \Delta a &= f(s, a, x, y, t), \quad (x, y) \in D, \end{aligned} \quad (6.1)$$

где μ_s, μ_a — параметры; $g(s, a, x, y, t), f(s, a, x, y, t)$ — заданные функции.

Такую систему можно использовать, например, для описания поведения двух веществ (примесей) в растворе с учетом эффектов диффузии и при наличии химических реакций между примесями. В этом случае систему (6.1) принято называть **уравнениями реакции-диффузии**. Величины, входящие в (6.1), имеют следующий физический смысл: $s(x, y, t)$ и $a(x, y, t)$ — концентрации примесей, μ_s, μ_a — коэффициенты диффузии, $g(s, a, x, y, t), f(s, a, x, y, t)$ — плотности внутренних источников примесей.

Систему уравнений (6.1) дополним краевыми условиями, для простоты выбрав условия Неймана на границе области D

$$\left. \frac{\partial s}{\partial n} \right|_{\Gamma} = 0; \quad \left. \frac{\partial a}{\partial n} \right|_{\Gamma} = 0. \quad (6.2)$$

Эти краевые условия соответствуют случаю непроницаемой для примесей границы Γ — нормальные компоненты плотностей потоков концентрации $\mathbf{i}_a \cdot \mathbf{n} = -\mu_a \mathbf{n} \cdot \nabla a$, $\mathbf{i}_s \cdot \mathbf{n} = -\mu_s \mathbf{n} \cdot \nabla s$ равны нулю.

Кроме этого, зададим начальное распределение концентраций примесей

$$s|_{t=0} = H_s(x, y), \quad a|_{t=0} = H_a(x, y), \quad (x, y) \in D, \quad (6.3)$$

где $H_s(x, y)$, $H_a(x, y)$ — известные функции.

Для определенности используем следующие выражения для плотностей источников концентраций

$$g(s, a) = \gamma \{s_0 - s - \rho F(s, a)\}, \quad f(s, a) = \gamma \{\alpha(a_0 - a) - \rho F(s, a)\},$$

$$F(s, a) = \frac{sa}{1 + s + Ks^2}. \quad (6.4)$$

Все величины, входящие в эти соотношения, за исключением, естественно, s и a , считаются постоянными параметрами. В данном примере функции g и f не зависят от x , y , t и эти аргументы опущены.

Формулы (6.4) соответствуют задаче об окраске шкур животных, подробно описанной, например, в книге [19]. В п. 6.4 эта задача будет детально исследована средствами FreeFem++.

6.2 Слабая формулировка задачи

Для аппроксимации задачи (6.1)–(6.4) по времени используем так называемую явно-неявную схему (ср. с (4.6), (4.7))

$$\frac{s^{m+1} - s^m}{\tau} - \mu_s \Delta s^{m+1} = \gamma \{s_0 - s^{m+1} - \rho F(s^m, a^m)\}, \quad (6.5)$$

$$\frac{a^{m+1} - a^m}{\tau} - \mu_a \Delta a^{m+1} = \gamma \{\alpha(a_0 - a^{m+1}) - \rho F(s^m, a^m)\}, \quad (6.6)$$

$$\left. \frac{\partial s^{m+1}}{\partial n} \right|_{\Gamma} = 0, \quad \left. \frac{\partial a^{m+1}}{\partial n} \right|_{\Gamma} = 0, \quad m = 0, 1, \dots, \quad (6.7)$$

где

$$s^m = s(x, y, t_m), \quad a^m = a(x, y, t_m), \quad t_m = m\tau. \quad (6.8)$$

Обратим внимание, что исходная задача (6.1)–(6.4) является *нелинейной* задачей относительно неизвестных s , a . Полученная же задача (6.5)–(6.8) относительно неизвестных s^{m+1} , a^{m+1} является *линейной*. Этого удалось достичь за счет использованного явно-неявного способа дискретизации. Производные по времени аппроксимируются обычными конечными

разностями, все остальные *линейные члены* уравнений и краевые условия выбираются в моменты времени $t = t_{m+1}$ (неявная схема), а *нелинейные члены* $F(s, a)$ выбираются в момент времени $t = t_m$ (явная схема). Впрочем, имеются и иные варианты аппроксимации для функции $F(s, a)$. Например, числитель этой функции, т. е. sa , можно представлять в виде $s^{m+1}a^m$ для уравнения (6.5) и в виде $s^m a^{m+1}$ для уравнения (6.6).

Слабую формулировку задачи (6.5)–(6.8) получим, умножая уравнения (6.5), (6.6) на *независимые* тестовые функции $v_s(x, y)$, $v_a(x, y)$, а затем складывая уравнения и интегрируя по частям при помощи формулы Грина (с учетом краевых условий (6.7))

$$\begin{aligned}
& \iint_D \left(\frac{s^{m+1} - s^m}{\tau} v_s + \mu_s \nabla s \cdot \nabla v_s \right) dx dy - \\
& - \iint_D \gamma (s_0 - s^{m+1} - \rho F(s^m, a^m)) v_s dx dy + \\
& + \iint_D \left(\frac{a^{m+1} - a^m}{\tau} v_a + \mu_a \nabla a \cdot \nabla v_a \right) dx dy - \\
& - \iint_D \gamma (\alpha (a_0 - a^{m+1}) - \rho F(s^m, a^m)) v_a dx dy = 0.
\end{aligned} \tag{6.9}$$

6.3 Фрагменты кодов на языке FreeFem++

Полный код на языке FreeFem++ для решения задачи (6.5)–(6.8) дан в п. 6.4.2. Приведем фрагменты программы, позволяющие использовать результаты, полученные ранее при решении нестационарной задачи для уравнения Лапласа (см. с. 62).

Здесь и далее используем следующие идентификаторы

| | | | | | | | | |
|-----------|---------------|------------|-----------|---------------|--------------|----------|---------------|--------------|
| s^{m+1} | \rightarrow | s | $g(s, a)$ | \rightarrow | gsa | α | \rightarrow | alpha |
| a^{m+1} | \rightarrow | a | $f(s, a)$ | \rightarrow | fsa | ρ | \rightarrow | rho |
| s^m | \rightarrow | spr | μ_s | \rightarrow | mus | β | \rightarrow | beta |
| a^m | \rightarrow | apr | μ_a | \rightarrow | mua | τ | \rightarrow | dt |
| v_s | \rightarrow | vs | K | \rightarrow | K | t | \rightarrow | t |
| v_a | \rightarrow | va | γ | \rightarrow | gamma | | | |

При составлении алгоритма следует учесть, что необходимо ввести *две* неизвестные функции **s** и **a** и для *каждой из них* свои тестовые функции, например, **vs**, **va**

Vh s, a, vs, va;

Слабая формулировка задачи (6.9) записывается в виде

```

problem Diffusion(s, a, vs, va, solver=UMFPACK) =
    int2d(Th)( s*vs + dt*mus*(dx(s)*dx(vs) + dy(s)*dy(vs)) )
    -int2d(Th)( ( spr + dt*gsa )*vs )

```

```
+int2d(Th)( a*va + dt*mua*(dx(a)*dx(va) + dy(a)*dy(va)) )
-int2d(Th)( ( apr + dt*fsa )*va ) ;
```

Сравнивая `problem Diffusion(s, a, vs, va)` с `problem Heat(u, v)` на с. 62, видим, что в данном случае в качестве аргументов `Diffusion` следует использовать `s, a, vs, va`, т. е. перечислять все неизвестные и тестовые функции. Алгоритм решения нестационарной задачи имеет вид (ср. с аналогичным для `problem Heat` на с. 62)

```
for (int m=0; m<=1000; m++)
{ gsa = gamma*(s0-spr - rho*spr*apr/(1+spr+K*spr^2));
  fsa = gamma*(alpha*(a0-apr) - rho*spr*apr/(1+spr+K*spr^2));
  t = t + dt;
  Diffusion;
  spr = s;   apr = a;
  plot(s);
}
```

Обратим внимание, что функции `gsa, fsa` вычисляются внутри цикла на каждом шаге по времени и должны быть предварительно описаны до их появления в строках кода, т. е. до записи `problem Diffusion`

`Vh gsa, fsa;`

Наконец, укажем как на языке `FreeFem++` в случае задачи с несколькими неизвестными функциями следует задавать краевые условия первого рода. Например, для задания однородных условий Дирихле на каком-либо участке границы с именем `Bn` в `problem Diffusion(...)` = необходимо добавить строку

$$+ \text{on}(\text{Bn}, s=0, a=0); \quad (s|_{\text{Bn}} = 0, \quad a|_{\text{Bn}} = 0).$$

Иными словами, краевые условия должны быть указаны для каждой неизвестной функции.

Учет краевых условий третьего рода и неоднородных условий второго рода, как обычно, осуществляется при записи слабой (вариационной) формулировки задачи, т. е. при помощи интегралов по контуру `int1d` и интегралов по области `int2d` (для краевых условий третьего рода).

6.4 Окраска шкур животных

Как уже говорилось при задании функций (6.4), задача (6.1)–(6.4) может моделировать процесс формирования окраски шкур животных [19]. Эта прекрасная задача как нельзя лучше позволяет продемонстрировать широкие возможности метода конечных элементов для построения решения в областях сложной формы.

Приведем минимально необходимые сведения, требующиеся для понимания результатов дальнейших расчетов. Предположим, что имеется шкура зародыша животного (двумерная область D сложной формы), на которой в процессе развития эмбриона формируется окраска, например, в виде

чередующихся полос, как у зебры, или пятен, как у леопарда. В простейшей модели считается, что на шкуре животного имеется начальное распределение двух веществ, одно из которых субстрат (красящий пигмент), а другое — косубстрат. В результате химических взаимодействий в присутствии фермента (катализатора) и процессов диффузии происходит перераспределение концентрации красящего вещества.

Система уравнений (6.1), (6.4) как раз и описывает двухкомпонентную смесь, в которой происходит превращение тирозина в меланин при наличии ферментов в эпидерме и (или) шерсти. Вещество с концентрацией s является субстратом (меланин), а вещество с концентрацией a — косубстратом (тирозин). Предполагается, что на шкуре имеется равномерное распределение субстрата s_0 и косубстрата a_0 . Члены $\gamma(s_0 - s)$ и $\gamma\alpha(a_0 - a)$ в плотностях источников концентраций (функции g и f) моделируют приток веществ к поверхности шкуры из тела эмбриона.

Функция $F(s, a)$ (см. (6.4)) моделирует реакцию, которую называют реакцией с ингибированием субстратом (K — коэффициент ингибирования). Термин «ингибирование субстратом» означает, что с ростом концентрации s скорость химической реакции $F(s, a)$ стремится к нулю — большое количество субстрата подавляет (ингибирует) процесс протекания реакций.

Процесс возникновения сложной окраски качественно можно объяснить следующим образом. Если в результате химических реакций между компонентами s и a в окрестности какой-либо точки (x, y) области D количество субстрата s становится достаточно большим, то протекание химической реакции полностью подавляется. В такой ситуации решающую роль в распределении концентрации играют диффузионные процессы. В результате диффузии концентрация субстрата s в точке (x, y) начинает уменьшаться и вновь «включаются» химические процессы, приводящие к увеличению концентрации субстрата. При некоторых значениях параметров могут возникнуть сложные пространственно-временные структуры, соответствующие полосам, пятнам и другим рисункам окраски шкуры животного.

Описанный механизм возможного образования структур называется диффузионной неустойчивостью и особенно ярко проявляется в окрестности точки равновесия (\tilde{s}, \tilde{a}) , которая является решением системы уравнений $f(s, a) = 0$, $g(s, a) = 0$ (и всей задачи в целом).

6.4.1 Вычислительный эксперимент

На рис. 6.1 показано образование пространственной структуры распределения субстрата в области D , которая имитирует шкуру домашней длиннохвостой кошки¹. Для проведения расчетов использован один из наборов параметров, предложенный в [19] (к сожалению, размеры области D там не указаны)

$$K = 0,125; \quad \rho = 13; \quad s_0 = 103; \quad a_0 = 77;$$

$$\alpha = 1,5; \quad \mu_a = 1; \quad \mu_s = \beta = 7; \quad \gamma = 510.$$

¹ Прототипом области D послужила шкура кошки учебной компьютерной лаборатории кафедры вычислительной математики и математической физики <http://vmmf.math.rsu.ru>

Равновесному решению соответствуют следующие значения

$$s = \tilde{s} = 24,95939605, \quad a = \tilde{a} = 24,97293070$$

(заметим, что в [19] приведены ошибочные значения $\tilde{s} = 24$ и $\tilde{a} = 23$).

В качестве начального распределения (6.3) взято малое возмущение стационарного решения (имитация случайного возмущения)

$$s = \tilde{s} + 10^{-2} \cos(12,765\pi x) \sin(12\pi y),$$

$$a = \tilde{a} + 10^{-5} \cos(10\pi x) \sin(16,786\pi y).$$

На рис. 6.1 хорошо видно, как с течением времени формируется пространственно-периодическая структура изолиний распределения концентрации s . На самом деле, на рис. 6.1 для лучшей визуализации приведена разность $s(x, y, t) - \tilde{s}$. Дело в том, что в задаче очень быстро устанавливается решение, близкое к стационарному, т. е. диффузионная неустойчивость возникает в окрестности точки (\tilde{s}, \tilde{a}) .

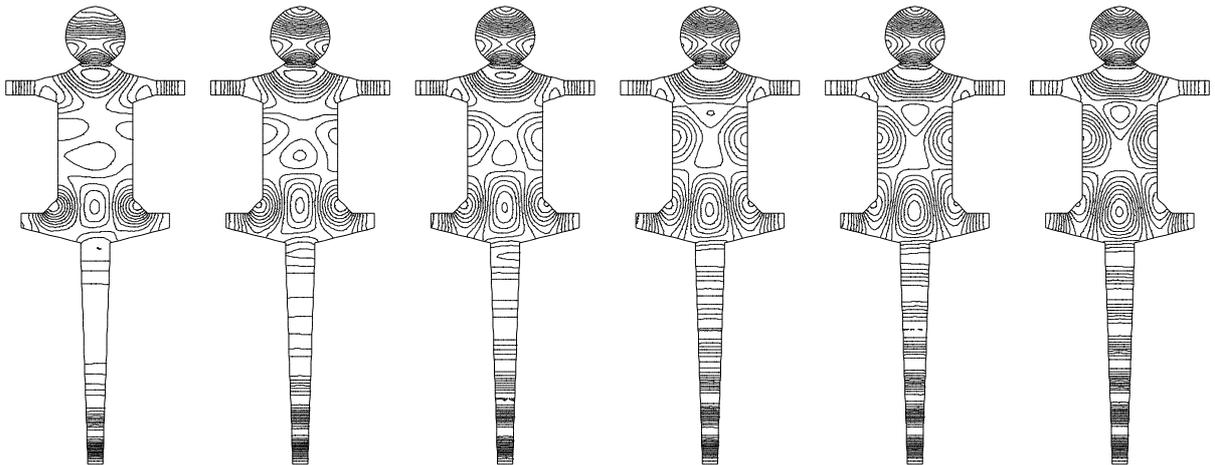


Рис. 6.1. Изолинии функции $s(x, y, t) - \tilde{s}$ при $t = 0,025m$, $m = 1, \dots, 6$

Рис. 6.1 показывает, что с течением времени формируется ярко выраженная полосатость протяженных областей (хвост, лапы). В областях с измеримыми размерами (туловище, голова) полосатость не так заметна.

Подчеркнем, что модель (6.1)–(6.4) реально описывает лишь двухцветный механизм формирования полос или пятен. Значениям $(s - \tilde{s}) > 0$ соответствует черный цвет, а значениям $(s - \tilde{s}) < 0$ — белый. На рис. 6.2 (второй слева) показано распределение черно-белых полос на шкуре. Для реализации такой визуализации был использован следующий код (конечно, необходимо описать массив **rr** — **Vh rr**)

```
for (int j=0; j<sdif[ ].n; j++)
{
    if (!(sdif[ ][j]>0)) { rr[ ][j]=1; }
    if (!(sdif[ ][j]<0)) { rr[ ][j]=0; }
}
plot(rr, bw=1);
```