Föreläsning 6 - Rumsliga modeller

En *ordinär differentialekvation* är en ekvation i en okänd funktion av en variabel, där derivator av funktionen kan förekomma i ekvationen. En *Partiell differentialekvation* är en ekvation i en okänd funktion av flera variabler, där derivator (partiella) av funktionen kan förekomma. En lösning utgörs av en funktion som uppfyller ekvationen (och eventuella rand/begynnelsevillkor).

Vi inleder med att undersöka en enkel slumpvandring i diskret tid och rum. Antag att en partikel befinner sig i någon position x i en dimension och efter tid Δt gör partikeln ett hopp av storlek Δx, med sannoliket $1/2$ till höger eller vänster. Hur snabbt rör sig en sådan partikel?

Låt $S_n = X_1 + X_2 + \ldots X_n$ vara positionen efter n hopp, som ges av summan av hopp $X_i = \Delta x$ om partikeln hoppar till höger och $X_i = -\Delta x$ om den hoppar till vänster. Vi söker nu väntevärdet av positionen:

$$E[S_n] = E[X_1 + \ldots + X_n] = E[X_1] + \ldots + E[X_n] = 0$$

Som ju är 0 eftersom väntevärdet av varje individuellt hopp är 0 (hoppar höger och vänster med lika sannolikhet!). Istället är man intresserad av ett mått på hur lång sträcka partikeln har färdats. Alltså kan partikeln färdats långt, trots att den i slutänden är tillbaka i startpositionen. Vi tittar då exempelvis på S_n^2:

$$\begin{aligned} E[S_n^2] &= E\left[\left(\sum_{i=1}^{n} X_i\right)^2\right] \\ &= E\left[\sum_{i=1}^{n} X_i^2\right] + 2E\left[\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} X_i X_j\right] \\ &= t + 0 \end{aligned}$$

Alltså är det typiska avståndet (distansen) partikel rört sig i storleksordning $\sqrt{E[S_t^2]} = \sqrt{t}$.

Kan vi säga något om sannolikheten att partikeln är i en given position x som funktion av tid t? Låt $p(x,t)$ vara sannolikheten att partikeln befinner sig i position x vid tid t. Vi får då följande uttryck för hur sannolikheten förändrad framåt i tid:

$$p(x, t + \Delta t) = \frac{1}{2}p(x - \Delta x, t) + \frac{1}{2}p(x + \Delta x, t) \tag{1}$$

Som kan tolkas som de 2 sätt man kan hamna i x vid tid $t + \Delta t$. Dels genom att man tidigare var i $x - \Delta x$ och hoppade in i x, eller att man befann sig i $x + \Delta x$ och hoppade in i x. Båda händelser sker med sannolikhet 1/2. Under antagandet att p är kontinuerlig i tid och rum kan vi Taylor-utveckla alla termer och får då

$$p(x, t + \Delta t) = p(x, t) + \Delta t \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\Delta t^2}{2} \frac{\partial^2 p}{\partial t^2} + HOT$$
$$p(x + \Delta x, t) = p(x, t) + \Delta x \frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\Delta x^2}{2} \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} + HOT$$
$$p(x - \Delta x, t) = p(x, t) - \Delta t \frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\Delta x^2}{2} \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} + HOT$$

Taylor-utvecklas alla termer på detta vis i Ekvation (1) fås

$$p(x, t) + \Delta t \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\Delta t^2}{2} \frac{\partial^2 p}{\partial t^2} = \frac{1}{2}(2p(x, t) + \Delta x^2 \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} + HOT$$

Detta ger efter förenkling

$$\Delta t \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\Delta t^2}{2} \frac{\partial^2 p}{\partial t^2} = \Delta x^2 \frac{\partial^2 p}{\partial x^2}$$
$$\frac{\partial p}{\partial t} = \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial^2 p}{\partial t^2} = \frac{\Delta x^2}{\Delta t} \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} + HOT$$

Om vi nu låter både Δt och Δx gå mot 0, på ett sådant sätt att kvoten $\frac{\Delta x^2}{\Delta t} = 2D$ fås följande välkända ekvation:

$$\frac{\partial p}{\partial t} = D \frac{\partial^2 p}{\partial x^2}$$

Som kallas diffusionsekvationen, eller inom fysik för värmeekvationen! Detta är en av de mest studerade PDE!

Fundamentallösning

Om man antar att begynnelsedata ges av $p(x, 0) = \delta(x)$ (dirac-delta) vilket betyder att partikeln garanterat befinner sig i origo vid start fås den s.k. fundamentallösningen

$$p(x, t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi D t}} e^{\frac{-x^2}{4Dt}}$$

i en rums-dimension!

I högre rums-dimensioner är diffusionsekvationen

$$\frac{\partial p}{\partial t} = D \nabla^2 p = D \left(\frac{\partial^2 p}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 p}{\partial y^2} \right)$$

Numeriska exempel för intuition av lösning

Vi kan välja ett enkelt exempel som löses numeriskt för att illustrera hur en lösning kan se ut!

Exempel 1 (Enkelt 1-D värme-problem)**.** *Antag att vi har en stav med fixa ändpunkter* $x = -1$ *och* $x = 1$*. Temperaturen i staven är vid starten* $t = 0$ *0 i hela staven, utom i den vänstra ändpunkten, där vi håller temperaturen fix till 20 grader. Diffusionskoefficienten ges av* $D = 4$ *(kallas i detta sammanhang termisk diffusivitet).*

Ett exempel på en typ av lösning man är intresserad av är en s.k. stationär lösning. Alltså en lösning i jämvikt:

$$\frac{\partial p}{\partial t} = 0 = D\frac{\partial^2 p}{\partial x^2}$$

Om vi undersöker fallet ovanför i 1-D får vi ekvationen $p''(x) = 0$ som har den allmänna lösningen $p(x) = Ax + b$. Med hjälp av randvillkor får vi då $p(-1,t) = 1$ och $p(1,t) = 0$ slutligen $p(x)$ (i jämvikt) $p(x) = -\frac{1}{2}x + \frac{1}{2}$.

Olika typer av randvillkor

För att kunna lösa en PDE krävs randvillkor och begynnelsevillkor. Begynnelsevillkor specificerar vad funktionen är vid tid $t = 0$ och är enbart en funktion av x. Randvillkor beskriver vad funktionen är på randen för alla tider. Det finns huvudsakligen två typer av randvillkor:

$$\text{Dirichlet villkor av typen } p(-1,t) = a, p(1,t) = b$$
$$\text{Neumann villkor av typen } p'(-1,t) = a, p'(1,t) = b$$

Dirichlet villkor specificerar funktionsvärde på randen (alltså krav på funktionsvärdet p) och Neumann villkor specificerar krav på derivatan (p') på randen.

Om man vill använda s.k. reflexiva randvillkor (saker studsar tillbaka då de når väggen) använder man följande villkor

$$p'(-1,t) = 0,\ p'(1,t) = 0$$

Vi undersöker ett enkelt numeriskt exempel av detta för att se skillnaden på Dirichlet och Neumann (reflexiva) randvillkor.

Reaktions-diffusions ekvationer

En utvidgning av diffusionsekvationen är *reaktions-diffusions ekvationen* som innehåller en s.k. reaktionsterm. En allmän ekvation är

$$\frac{\partial p}{\partial t} = D\frac{\partial^2 p}{\partial x^2} + f(p)$$

där f är en funktion som beskriver reaktionen. Exempelvis kan reaktionen ta formen $f(p) = p\left(1 - \frac{p}{K}\right)$ för att beskriva tillväxt med bärförmåga K. I ett kopplat system av reaktions-diffusionsekvationer kan en sådan term beskriva interaktionen mellan olika "arter". Jämför med Lotka-volterra ekvationerna som beskriver predator-prey interaktioner, eller smittspridningsmodeller.

Numeriska lösare för PDE