6 Uždavinys

Arnas Vaicekauskas

2024 m. rugsėjo 26 d.

1 Matematinis modelis

1.1 Bedimensis modelis

$$\frac{\partial c_1}{\partial t} = -3c_1c_2 + D\Delta c_1 \tag{1a}$$
$$\frac{\partial c_2}{\partial t} = -5c_1c_2 + D\Delta c_2 \tag{1b}$$
$$\frac{\partial c_3}{\partial t} = 2c_1c_2 \tag{1c}$$

kur c_1, c_2, c_3 yra bedimensė medžiagų koncentracija, Δ - Laplaso operatorius, t - laikas, D - bedimensis medžiagų c_1 ir c_2 difuzijos koeficientas.

1.2 Elementų maišymasis dviejose dimensijose

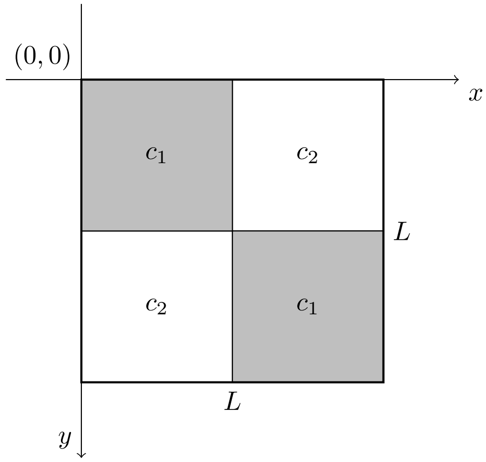
Interpretavus bedimensį modelį (1) dviejose dimensijose gauname lygtis

$$\frac{\partial c_1}{\partial t} = -3c_1c_2 + D\left(\frac{\partial^2 c_1}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c_1}{\partial y^2}\right) \tag{2a}$$
$$\frac{\partial c_2}{\partial t} = -5c_1c_2 + D\left(\frac{\partial^2 c_2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c_2}{\partial y^2}\right) \tag{2b}$$
$$\frac{\partial c_3}{\partial t} = 2c_1c_2 \tag{2c}$$

Šiam modeliui yra taikomos šios pradinės ir kraštinės sąlygos:

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial c_1}{\partial x}\Big|_{x=0} = \frac{\partial c_1}{\partial x}\Big|_{x=L} = \frac{\partial c_2}{\partial x}\Big|_{x=0} = \frac{\partial c_2}{\partial x}\Big|_{x=L} = 0, && y \in [0, L], t \in [0, T]\\
&\frac{\partial c_1}{\partial y}\Big|_{y=0} = \frac{\partial c_1}{\partial y}\Big|_{y=L} = \frac{\partial c_2}{\partial y}\Big|_{y=0} = \frac{\partial c_2}{\partial y}\Big|_{y=L} = 0, && x \in [0, L], t \in [0, T]\\
&c_1(x,y,0) = \begin{cases} 1, \text{jei } x \in A \\ 0, \text{kitaip} \end{cases} \quad c_2(x,y,0) = \begin{cases} 1, \text{if } x \notin A \\ 0, \text{otherwise} \end{cases}, && (x,y) \in [0,L]^2, A = \left[0, \tfrac{L}{2}\right]^2 \cup \left[\tfrac{L}{2}, L\right]^2\\
&c_3(x,y,0) = 0, && (x,y) \in [0,L]^2,
\end{aligned}$$

kur L - bedimensis kubo kraštinės ilgis, T - bedimensė proceso trukmė.



1 pav.: Dvimačio modelio pradinės sąlygos laiku $t = 0$. Pilka spalva žymi plotą priklausantį aibei A.

2 Skaitiniai modeliai

Remiantis išreikštiniu baigtinių skirtumų metodu iš dvimačio modelio galima gauti skaitinį modelį.

$$\frac{c_{1,i,j}^{n+1} - c_{1,i,j}^{n}}{\Delta t} = -3c_{1,i,j}^{n}c_{2,i,j}^{n} + D\left(\frac{c_{1,i-1,j}^{n} - 2c_{1,i,j}^{n} + c_{1,i+1,j}^{n}}{(\Delta x)^2} + \frac{c_{1,i,j-1}^{n} - 2c_{1,i,j}^{n} + c_{1,i,j+1}^{n}}{(\Delta y)^2}\right) \tag{3a}$$

$$\frac{c_{2,i,j}^{n+1} - c_{2,i,j}^{n}}{\Delta t} = -5c_{1,i,j}^{n}c_{2,i,j}^{n} + D\left(\frac{c_{2,i-1,j}^{n} - 2c_{2,i,j}^{n} + c_{2,i+1,j}^{n}}{(\Delta x)^2} + \frac{c_{2,i,j-1}^{n} - 2c_{2,i,j}^{n} + c_{2,i,j+1}^{n}}{(\Delta y)^2}\right) \tag{3b}$$

$$\frac{c_{3,i,j}^{n+1} - c_{3,i,j}^{n}}{\Delta t} = 5c_{1,i,j}^{n}c_{2,i,j}^{n}, \tag{3c}$$

kur $n \in [0, T)$ - laiko momentas, $i \in [0, N_L)$ - diskrečios erdvės taško koordinatė x ašyje, $j \in [0, N_L)$ - diskrečios erdvės taško koordinatė y ašyje, $c_{1,i,j}^{n}$ - pirmos medžiagos kiekis diskrečios erdvės taške i, j laiko momentu n, $c_{2,i,j}^{n}$ - antros medžiagos kiekis diskrečios erdvės taške i, j laiko momentu n, $c_{3,i,j}^{n}$ - trečios medžiagos kiekis diskrečios erdvės taške i, j laiko momentu n, Δt - laiko žingsnis, Δx - diskrečios erdvės žingsnis x ašimi, Δy - diskrečios erdvės žingsnis y ašimi.