

## Комп'ютерне моделювання задач прикладної математики

Реакційно-дифузійні системи та їх застосування

## 1. Розподіл температури по пластині

## Постановка задачі

### Дано

- Прямокутна пластина зі сталим коефіцієнтом температуропровідності D.
- Задано початковий розподіл температури T = T(x, y), потужність Wi та координати (xi, yi) джерел тепла.

### Задача

Проаналізувати зміну температури різних точок пластини з часом.

## Граничні умови

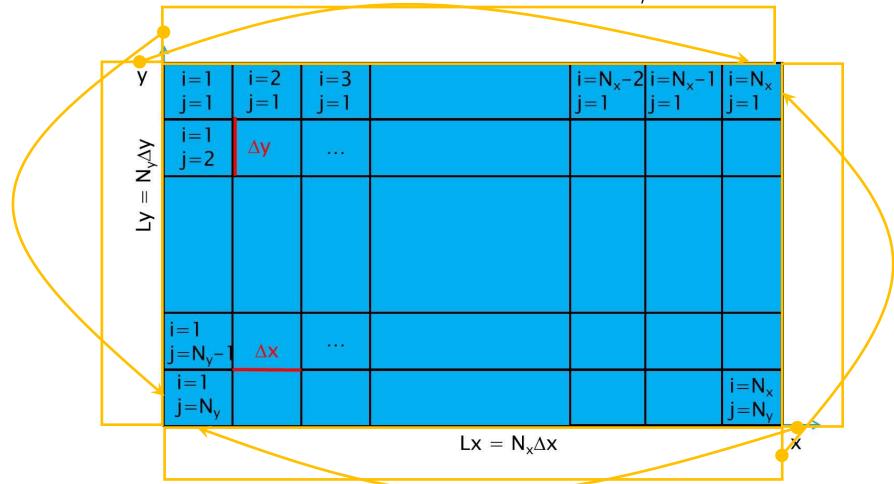
Періодичні:

$$\forall j T(0,j) = T(N_x,j);$$

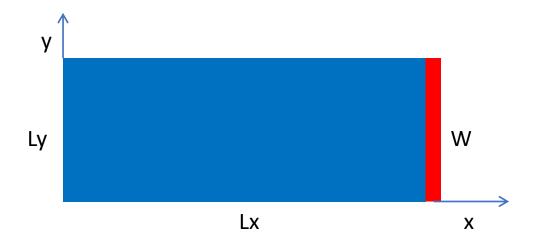
$$\forall j T(N_x+1,j) = T(1,j)$$

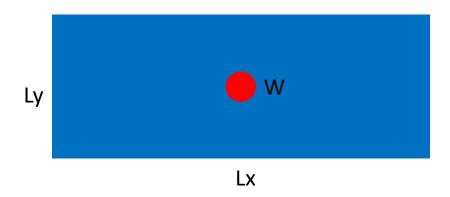
$$\forall i T(i,0) = T(i,N_y)$$

$$\forall i \ T(i,N_v+1) = T(i,1)$$



## Постановка задачі





### Рівняння теплопровідності

$$\frac{\partial T(\boldsymbol{r},t)}{\partial t} = D\Delta T(\boldsymbol{r},t)$$

### Температура поверхні

$$T = T(x,y,t)$$

### Початкові умови

$$T(x,y,t=0) = T_0(x,y)$$

### Граничні умови

- фіксовані
- періодичні
- ....

### Потужність джерела тепла

- W(x,y,t) змінна у часі
- W(x,y) не змінна у часі

## Дискретне рівняння теплопровідності

# i,j-1 i-1,j i,j i+1,j

### Рівняння теплопровідності

$$\frac{\partial T(\boldsymbol{r},t)}{\partial t} = D\Delta T(\boldsymbol{r},t)$$

Перехід до дискретного простору

$$T(x,y) = T(i,j)$$

Оператор Лапласа

$$\Delta T(x,y) = \Delta T(i,j) = \left(\frac{T_{i+1,j} - 2T_{i,j} + T_{i-1,j}}{(\Delta_x)^2} + \frac{T_{i,j+1} - 2T_{i,j} + T_{i,j-1}}{(\Delta_y)^2}\right)$$

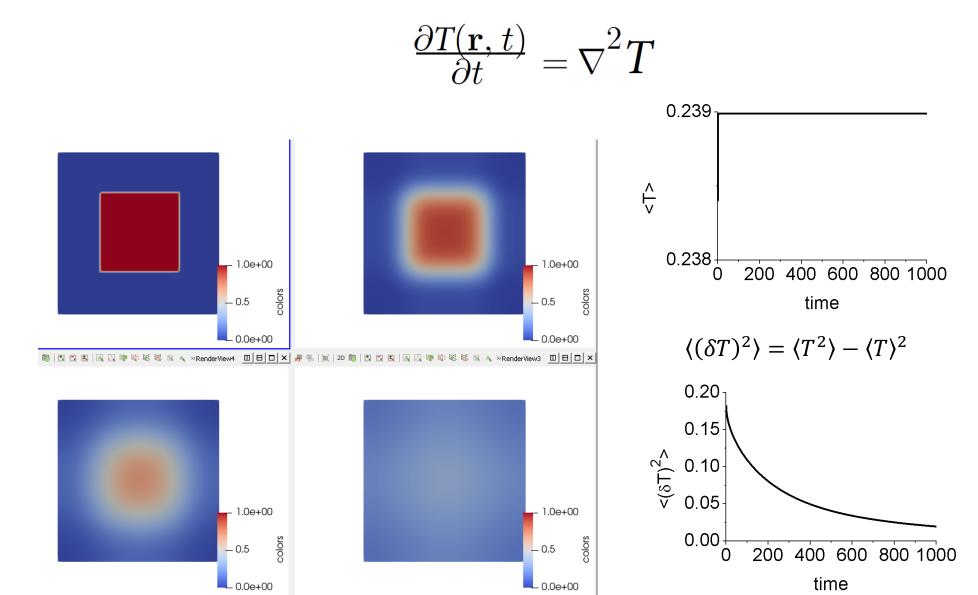
Рівняння теплопровідності

$$T_{i,j}(t + \Delta t) = T(i,j) + \left(D_x \frac{T_{i+1,j} - 2T_{i,j} + T_{i-1,j}}{(\Delta_x)^2} + D_y \frac{T_{i,j+1} - 2T_{i,j} + T_{i,j-1}}{(\Delta_y)^2}\right) \Delta t + W_{i,j} \Delta t$$

## Алгоритм

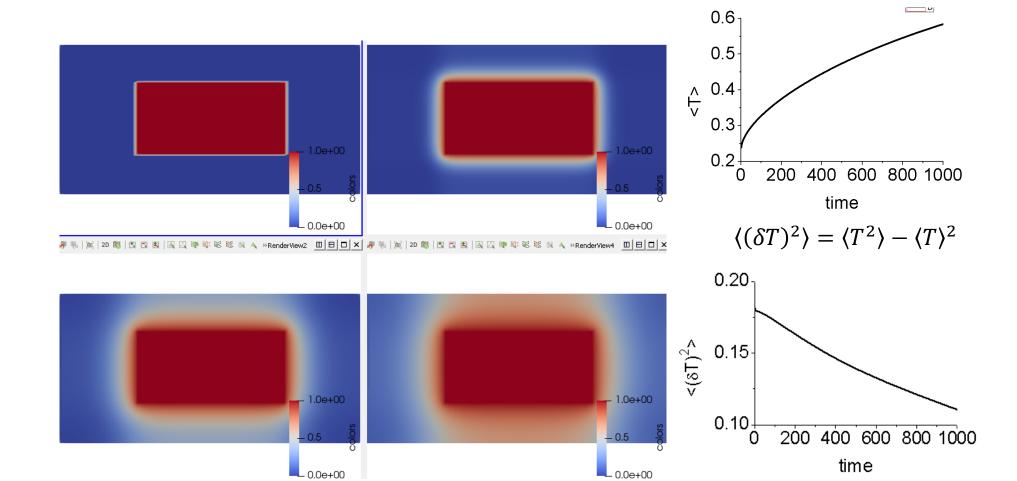
- Розбиваємо континуальний простір поля пластини на однакові домени розміром  $\Delta \times \Delta$  та вважаємо, що температура вздовж окремого домена є сталою величиною.
- Задаємо коефіцієнт дифузії D (у неоднорідному випадку окремо вздовж кожного виміру x та y:  $D_x$  ma  $D_y$ . Задаємо початковий розподіл температури Ti,j (t = 0) (де i, j визначають координати окремого домена на гратці). Встановлюємо координати і потужності джерел тепла Wi,j. Задаємо t = 0.
- Запускаємо цикл за t. Шляхом послідовного перебору всіх вузлів гратки (окремих доменів) за допомогою різницевої схеми перераховуємо температури доменів на наступному кроці за часом. На цьому етапі створюємо два цикли за i та за j і перераховуємо температуру кожного домена за формулою обраного методу.
- Виводимо поточний розподіл температури на екран, зафарбовуючи елементи так, що різним температурам відповідають різні кольори.
- Збільшуємо час на крок  $\Delta t$ .
- Якщо цикл за t закінчився вихід із програми

## Без джерела температури



# 3 постійним джерелом температури

$$\frac{\partial T(\mathbf{r},t)}{\partial t} = \nabla^2 T + W(\mathbf{r})$$

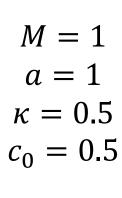


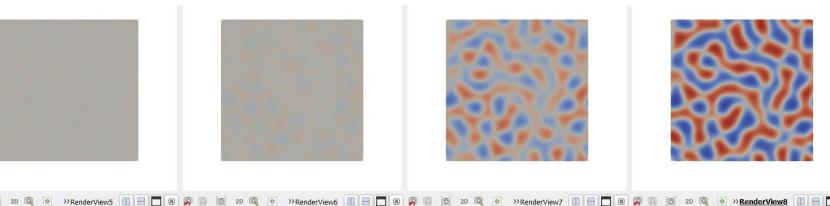
# 2. Фазове розшарування бінарних систем

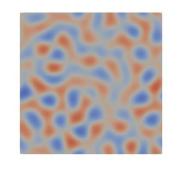
Динамічне рівняння еволюції концентрації речовини с

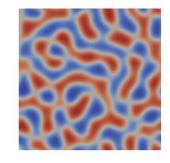
$$\frac{\partial c}{\partial t} = M\nabla^2 \left[ \frac{df}{dc} - \kappa \nabla^2 c \right]$$

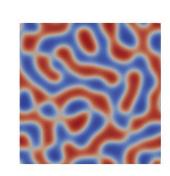
$$f(c) = c^2(1 - ac)^2$$
; M = 1;  $\kappa = 0.5$ 

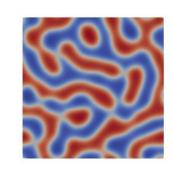


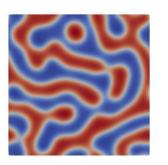


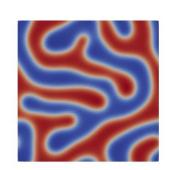










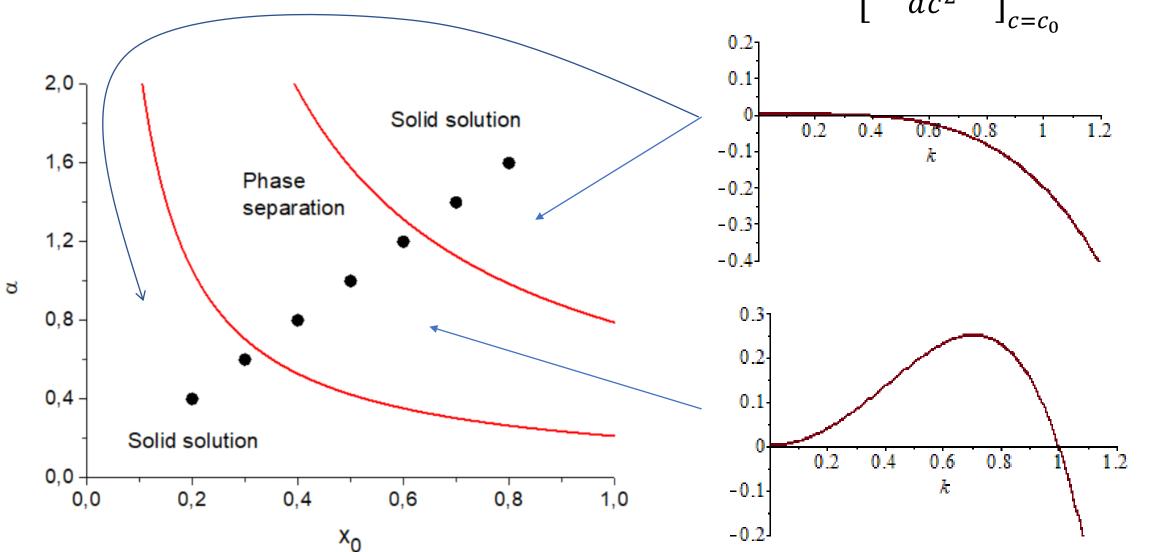


## Діаграма стійкості

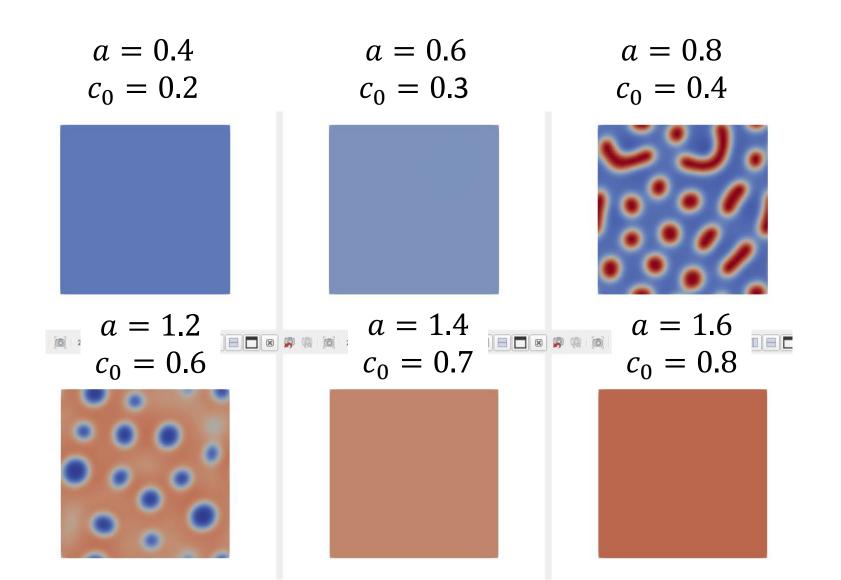
$$\frac{d^2f(c;\varepsilon)}{dc^2} = 0$$

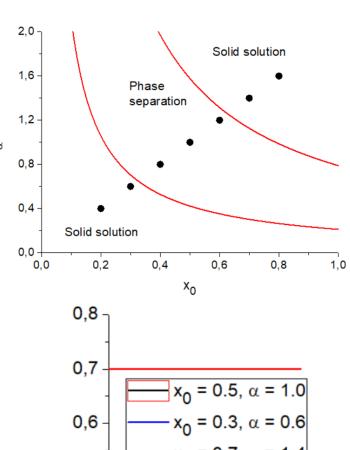
### Показник стійкості

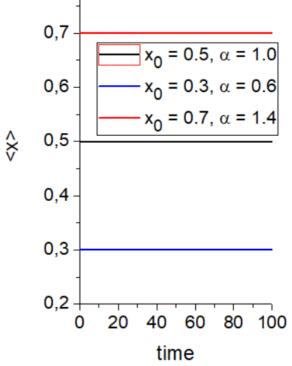
$$\lambda = -Mk^2 \left[ \frac{d^2 f(c; \varepsilon)}{dc^2} \right]_{c=c} - M\kappa k^4$$



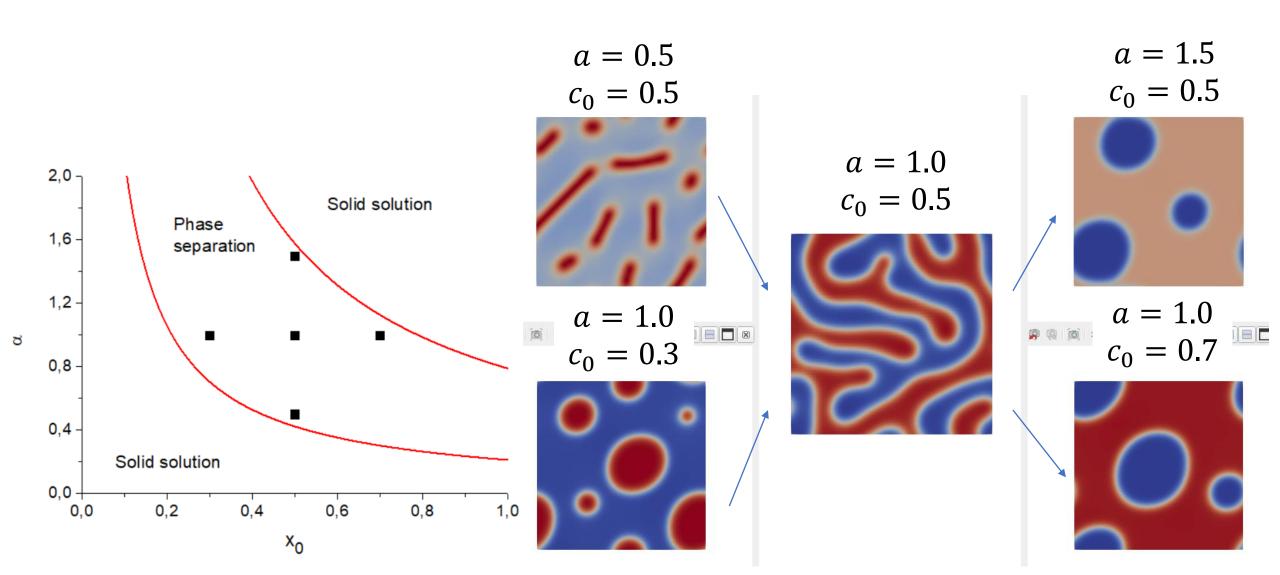
### Еволюція в різних областях фазової діаграми





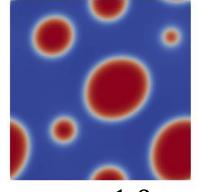


### 3. Вплив параметра та початкової концентрації

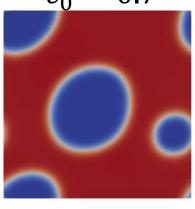


# 4. Статистичні властивості: середній розмір структур та їх кількість— за бажанням на додаткові бали

$$a = 1.0$$
  
 $c_0 = 0.3$ 



$$a = 1.0$$
 $c_0 = 0.7$ 



Порахувати еволюцію кількості структур та їх середнього розміру (радіусу) для двох випадків:

випадків: 1) a=1.0,  $c_0=0.3$  та a=1.0,  $c_0=0.7$  для системи розміром 256х256. Умова реалізації структур у першому випадку с > 0.5, у другому випадку с < 0.5.

### Типовий приклад

