

В. С. Чеканов (Ставрополь, СевКавГТУ). **Математическое моделирование процесса самоорганизации в наноструктурированной среде.**

В работе, представленной данным сообщением, рассмотрено применение интерактивной среды COMSOL Multiphysics для решения задачи моделирования автоволнового процесса. Получено решение системы нелинейных дифференциальных уравнений в частных производных (PDE) методом конечных элементов.

Математическая модель наблюдаемого автоволнового процесса представлена в виде системы уравнений:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_s}{\partial t} + D_\rho \left(\frac{\partial^2 \rho_s}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \rho_s}{\partial y^2} \right) &= f(t), \quad x \in (0, l_1), \quad y \in (0, l_2), \quad t > 0, \\ \frac{\partial E}{\partial t} &= D_E \left(\frac{\partial^2 E}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 E}{\partial y^2} \right) - \beta \rho_s - E, \end{aligned} \quad (1)$$

где ρ_s — поверхностная плотность заряда, выступает в качестве «активатора» процесса; функция E выступает в качестве «ингибитора», D_ρ — коэффициент диффузии «активатора»; D_E — коэффициент диффузии ингибитора, $j(t)$ — нелинейная функция (вектор плотности тока) определяет специфические «возбудимые» свойства системы. Приближение E к 0 еще не значит, что система возвратилась в исходное состояние. Увеличение ее значения в области фронта автоволны уменьшает скорость его распространения вплоть до полной остановки и смены направления распространения.

Первое уравнение системы — нелинейное дифференциальное уравнение в частных производных параболического типа — описывает процесс «активации» автоволны, второе уравнение описывает процесс ингибирования.

Плотность тока $j(t)$ является разрывной функцией по первой производной, поэтому для решения системы уравнений (1) было проведено ее сглаживание средствами программы MatLab 6.5, массив таблично заданной сглаженной функции $j(t)$ был внедрен в модель, построенную в системе COMSOL Multiphysics.

Был использован прикладной режим «General form», выбор которого обусловлен нелинейностью рассматриваемого процесса. Для задания системы уравнений добавлялась функция «Multyphysics». В качестве основного процесса задавался процесс «активирования». В режиме мультифизического комбинирования задавалось уравнение, решаемое совместно с основным — это второе уравнение системы (1). То есть в качестве совместного процесса мы определяем «ингибирование» АВ-процесса. В качестве константы задавался коэффициент диффузии D_ρ , его значения, полученные экспериментально, подбирались на основании работы, коэффициент диффузии ингибитора на этом этапе исследования не учитываем. Массив таблично заданной сглаженной функции $j(t)$ импортировался из системы MatLab. После определения граничных условий строилась сетка конечных элементов. Решение получали в виде цветового поверхностного графика (2D), показанного на рис. Приведенное решение представляет собой динамику распределения плотности заряда ρ_s .

Таким образом, применение интерактивной среды COMSOL Multiphysics позволяет не только адекватно моделировать сложный нелинейный автоволновой процесс, но и визуализировать полученные результаты.

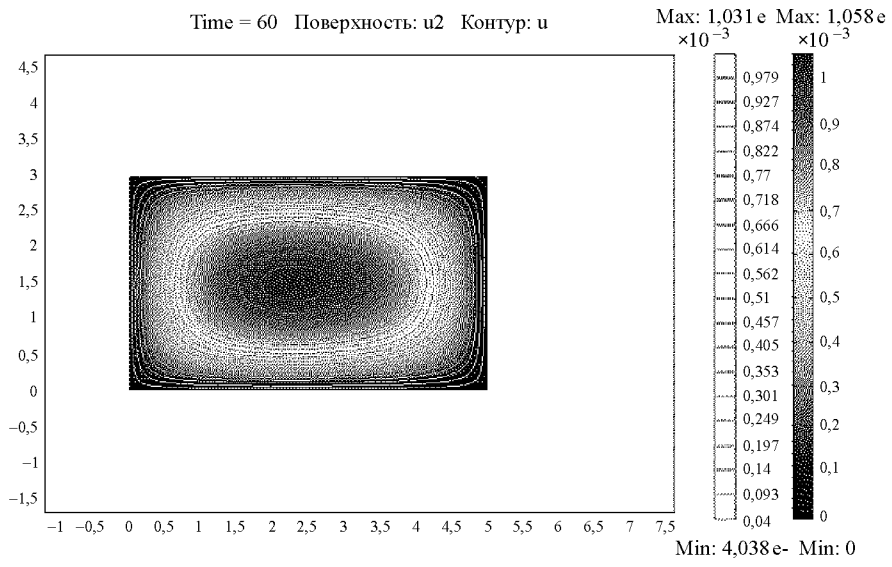


Рис. Распределение плотности поверхностного заряда