

МОДЕЛИРОВАНИЕ ФОРМИРОВАНИЯ И ДИНАМИКИ РЕЗКИХ ПЕРЕХОДНЫХ СЛОЕВ В ЗАДАЧАХ РЕАКЦИЯ-ДИФФУЗИЯ-АДВЕКЦИЯ

Грачёв Н.Е.

Московский государственный институт электроники и математики,
109028, Москва, Б.Трехсвятительский пер., д.3,
Тел.: 8 (495) 916-89-21
E-mail: grachev_nick@mail.ru

Нелинейные уравнения реакции-диффузии-адвекции (РДА) вида

$$\varepsilon^2 \left(\Delta u - \frac{\partial u}{\partial t} + \gamma(x) \frac{\partial u}{\partial y} \right) = f(u) \quad (1)$$

могут служить математическими моделями разнообразных физических процессов. Здесь ε^2 - малый параметр (коэффициент диффузии), $u \in [-1, 1]$ - неизвестная величина, $\gamma(x)$ - заданная гладкая функция, $f(u)$ - кубическая нелинейность. Решение уравнения (1) будем искать в виде резкого переходного слоя. Показано, что данная модель может описывать формирование и распространение фронта внутрислоевого горения при добыче углеводородов, а также фазовое разделение, возникающее на поверхности липидных биомембран. Доказана теорема [3], гласящая, что контрастная структура (фронт горения/фазовое разделение) в решении задачи (1) сформируется ко времени $t_A(\varepsilon) = A\varepsilon^2 |\ln(\varepsilon)|$, A - постоянная. При помощи асимптотических методов получен закон движения переходного слоя.

Построена модель нефтеносного пласта в термогидродинамическом симуляторе CMG STARS, при помощи которой исследовано влияние величины коэффициента диффузии кислорода на ширину и время формирования фронта горения. Показано хорошее соответствие теоретических оценок и численного эксперимента.

Методом Монте-Карло исследована многочастичная модель, состоящая из двух типов взаимодействующих фотосистем. Белковые комплексы PSI и PSII представлены в виде взаимодействующих между собой частиц, размещенных на двумерной поверхности. В качестве потенциалов взаимодействия между частицами выбраны кулоновское отталкивание с экранированием и "опосредованное липидами" притяжение между комплексами. Показано существование фазового и компонентного разделения в данной системе. Процессы формирования фазового и компонентного разделения описаны при помощи теории фазового поля. Вариацией функционала свободной энергии системы были получены уравнения типа Аллена-Кана - уравнение реакции диффузии (1) при $\gamma(x) = 0$. Асимптотический анализ уравнения Аллена-Кана позволил оценить время формирования фазового разделения, а также ширину переходного слоя между гелеобразной и жидкой фазами.

Литература.

1. Волков В.Т., Грачёв Н.Е., Нефедов Н.Н., Николаев А.Н. О формировании резких переходных слоев в двумерных моделях реакция-диффузия // *Ж. вычислит. матем. и матем. физики*, том 47, номер 8, год 2007. Стр. 1356-1364.