

ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЗМОВ ВОЗНИКНОВЕНИЯ АВТОВОЛНОВЫХ СТРУКТУР НА ФРОНТЕ РЕАКЦИИ

Якупов Э.О., Полежаев А.А.

Физический Институт им. П.Н. Лебедева Российской академии наук,
Ленинский просп. 53, 119991 Москва
E-mail: edward.thrst@gmail.com

Есть много примеров, когда химическая реакция протекает не однородно в пространстве, а в виде распространяющегося фронта. К таковым можно отнести реакцию между исходно пространственно разделёнными реагентами, образующими в результате реакции нерастворимое вещество, выпадающее в осадок (так называемые структуры Лизеганга), а также СВС – самораспространяющийся высокотемпературный синтез. Другим ярким примером является распространение фронта горения. Этим явлениям посвящено множество экспериментальных и теоретических исследований, в которых продемонстрировано, что на таких фронтах могут возникать различные неустойчивости, приводящие как к осцилляциям, так и к формированию различных пространственных структур. Относительно недавно экспериментально было продемонстрировано, что на фронте пламени могут возникать спиральные и концентрические автоволновые структуры. Механизм их формирования до сих пор не понят. В настоящем исследовании мы предлагаем качественное объяснение механизма формирования этих структур на основе построения и численного исследования соответствующих математических моделей.

В работе представлены результаты моделирования и численных расчетов на двумерных областях цилиндра, по которому движется фронт пламени. Предполагается, что структуры на фронте реакции образуются в результате взаимодействия двух подсистем: первая ответственна за формирование фронта, а вторая, параметрически зависящая от первой, – за формирование самих структур. В случае моделирования концентрических волн бралось сечение через ось цилиндра, где располагается источник автоколебаний; в случае спиральных волн выбиралась цилиндрическая поверхность. Процесс образования и поведения волны на фронте реакции описывается системой двух нелинейных дифференциальных уравнений параболического типа (модель типа ФитцХью - Нагумо в одном случае и Орегонатор в более реалистичной схеме). За возникновение самого фронта отвечало уравнение Фишера - КПП. Расчет проводился с использованием разностной схемы Кранка-Николсона. В численных экспериментах продемонстрировано, что данный механизм способен качественно объяснить возникновение на фронте реакции наблюдаемых автоволновых структур.

Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ: грант 17-01-00070.