

**ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫЕ УРАВНЕНИЯ И ИХ ПРИЛОЖЕНИЯ
В МАТЕМАТИЧЕСКОМ МОДЕЛИРОВАНИИ**

**СБОРНИК МАТЕРИАЛОВ
XV МЕЖДУНАРОДНОЙ НАУЧНОЙ КОНФЕРЕНЦИИ**



Саранск
2021

НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
МОРДОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ ИМ. М.В. КЕЛДЫША РАН
СРЕДНЕ-ВОЛЖСКОЕ МАТЕМАТИЧЕСКОЕ ОБЩЕСТВО

**ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫЕ УРАВНЕНИЯ И ИХ ПРИЛОЖЕНИЯ
В МАТЕМАТИЧЕСКОМ МОДЕЛИРОВАНИИ**

**СБОРНИК МАТЕРИАЛОВ
XV МЕЖДУНАРОДНОЙ НАУЧНОЙ КОНФЕРЕНЦИИ**

Саранск
15 – 18 июля 2021 г.

Саранск
2021

УДК 510:004.5
ББК В1
Д503

Редакционная коллегия:

член-корр. РАН, д.ф.-м.н. профессор В. Ф. Тишкин (отв. редактор);
д.ф.-м.н. профессор И. В. Бойков;
д.ф.-м.н. профессор П. А. Вельмисов;
д.ф.-м.н. профессор В. З. Гринес;
д.ф.-м.н. профессор В. К. Горбунов;
д.ф.-м.н. профессор Е. Б. Кузнецов;
д.ф.-м.н. профессор О. В. Починка;
к.ф.-м.н. доцент П. А. Шаманаев (составитель).

Д503 Дифференциальные уравнения и их приложения в математическом моделировании [Электронный ресурс]: Сборник материалов XV Международной научной конференции (Саранск, 15-18 июля 2021 г.) / редкол.: В.Ф. Тишкин (отв. ред.) [и др.]. – Саранск: СВМО, 2021. – 211 с. Режим доступа: <http://conf.svmo.ru/files/2021/ProceedingsSaransk2021.pdf>, свободный. – Загл. с экрана.

ISBN 978-5-901661-53-6

Настоящее издание содержит материалы докладов участников XV Международной научной конференции «Дифференциальные уравнения и их приложения в математическом моделировании», проходившей в Национальном исследовательском Мордовском государственном университете им. Н. П. Огарева с 15-18 июля 2021 г.

Представляет интерес для научных работников, студентов и аспирантов.

УДК 510:004.5
ББК В1
Д503

Публикуется на основании Устава Межрегиональной общественной организации «Средне-Волжское математическое общество» (п. 2.2) и по решению редакционно-издательского отдела СВМО.

ISBN 978-5-901661-53-6

© Коллектив авторов, 2021
© Оформление. СВМО, 2021

Предисловие

Настоящее издание содержит материалы докладов XV Международной научной конференции «Дифференциальные уравнения и их приложения в математическом моделировании», которая была проведена с 15 по 18 июля 2021 г. в г. Саранск (Россия). Организаторами конференции традиционно выступили Национальный исследовательский Мордовский государственный университет им. Н. П. Огарева, Институт прикладной математики им. М. В. Келдыша РАН и Средне-Волжское математическое общество.

Научные конференции по дифференциальным уравнениям и их приложениям в математическом моделировании в Мордовском государственном университете им. Н.П. Огарёва проводятся регулярно с 1994 года. Основателем и идейным вдохновителем научных конференций и школ-семинаров являлся талантливый ученый и организатор д.ф.-м.н. профессор Е.В. Воскресенский. Он руководил этими мероприятиями до 2008 года. С 2009 года председателем конференций является член-корреспондент РАН, д.ф.-м.н. профессор В.Ф. Тишкин (зав. отделом Института прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН, г. Москва, профессор кафедры прикладной математики, дифференциальных уравнений и теоретической механики ФГБОУ ВПО «МГУ им. Н.П. Огарёва», г. Саранск).

Работа конференции проводилась по секциям:

1. Численные методы решения дифференциальных уравнений и вычислительная физика.
2. Качественные и асимптотические методы дифференциальных и интегро-дифференциальных уравнений.
3. Дифференциальные уравнения и их приложения в физических, химических, биологических, экономических и других процессах.
4. Уравнения в частных производных и их приложения в математическом моделировании.

Все доклады, представленные на конференции, были предварительно прорецензированы Программным комитетом.

Организаторы благодарны всем участникам конференции за интересные доклады и плодотворную дискуссию.

Программный и организационный комитеты
XV Международной научной конференции «Дифференциальные
уравнения и их приложения в математическом моделировании»
Саранск, 15 – 18 июля 2021 года

Председатель организационного комитета:

С. М. Вдовин, ректор Национального исследовательского Мордовского государственного университета им. Н.П. Огарёва (г. Саранск).

Организационный комитет:

зам. председателя
организационного
комитета

д.т.н., профессор	П.В. Сенин,	г. Саранск,	Россия,
к.ф.-м.н., доцент	И.И. Чучаев,	г. Саранск,	Россия,
к.ф.-м.н., доцент	Л.А. Сухарев,	г. Саранск,	Россия,
к.ф.-м.н., доцент	П.А. Шаманаев,	г. Саранск,	Россия,
к.ф.-м.н., доцент	Т.Ф. Мамедова,	г. Саранск,	Россия,
к.ф.-м.н., доцент	С.М. Мурюмин,	г. Саранск,	Россия,
к.ф.-м.н., доцент	Д.К. Егорова,	г. Саранск,	Россия,
к.ф.-м.н., доцент	А.Н. Тында,	г. Пенза,	Россия,
к.ф.-м.н., доцент	Е.В. Десяев,	г. Саранск,	Россия,
к.ф.-м.н., доцент	А.О. Сыромясов,	г. Саранск,	Россия,
к.ф.-м.н., доцент	Т.Е. Бадюкина,	г. Саранск,	Россия,
к.ф.-м.н., с.н.с.	М.Н. Вишнякова,	г. Саров,	Россия,
к.ф.-м.н., доцент	О.С. Язовцева,	г. Саранск,	Россия,
к.ф.-м.н., доцент	В.Ф. Масягин,	г. Саранск,	Россия,
аспирант	А.В. Бикеев,	г. Саранск,	Россия,
аспирант	Д.В. Галкин,	г. Саранск,	Россия,
аспирант	С.Х. Зинина,	г. Саранск,	Россия,
аспирант	Ю.В. Напалкова,	г. Саранск,	Россия,
аспирант	Р.Р. Альбикив,	г. Саранск,	Россия,
аспирант	Е.С. Капустина,	г. Саранск,	Россия,
аспирант	А.И. Кулягин,	г. Саранск,	Россия,
аспирант	Н.Н. Чернышов,	г. Саранск,	Россия,
аспирант	И.В. Стенин,	г. Саранск,	Россия,
аспирант	Т.В. Меньшакова,	г. Саранск,	Россия,
аспирант	А.Д. Якунина,	г. Саранск,	Россия,
аспирант	Е.Е. Яшин,	г. Саранск,	Россия,
аспирант	В.И. Назаров,	г. Саранск,	Россия,
аспирант	А.Ф. Карчиганов,	г. Саранск,	Россия,
аспирант	А.И. Поверинов,	г. Саранск,	Россия,
аспирант	А.А. Шушпанов,	г. Саранск,	Россия,
аспирант	М.М. Халиков,	г. Саранск,	Россия,
аспирант	Н.В. Пименова,	г. Саранск,	Россия,
аспирант	О.Н. Терёхина,	г. Саранск,	Россия,
аспирант	Д.А. Шишканов,	г. Саранск,	Россия.

Председатель программного комитета:

В. Ф. Тишкин, член-корреспондент РАН, профессор, д. ф.-м. н., заведующий отделом ИПМ им. М. В. Келдыша РАН (г. Москва).

Программный комитет:

зам. председателя

программного комитета

к.ф.-м.н., доцент	Р.В. Жалнин,	г. Саранск,	Россия,
академик РАН	Е.И. Моисеев,	г. Москва,	Россия,
д.ф.-м.н., профессор	А.С. Андреев,	г. Ульяновск,	Россия,
д.ф.-м.н., профессор	Д.В. Баландин,	г. Н. Новгород,	Россия,
д.ф.-м.н., профессор	И.В. Бойков,	г. Пенза,	Россия,
д.ф.-м.н., профессор	П.А. Вельмисов,	г. Ульяновск,	Россия,
д.ф.-м.н., профессор	В.К. Горбунов,	г. Ульяновск,	Россия,
д.ф.-м.н., профессор	В.З. Гринес,	г. Н. Новгород,	Россия,
д.ф.-м.н., профессор	И.М. Губайдуллин,	г. Уфа,	Россия,
д.ф.-м.н., профессор	Ю.Н. Дерюгин,	г. Саров,	Россия,
д.ф.-м.н., профессор	А.П. Жабко,	г. С.-Петербург,	Россия,
д.ф.-м.н., профессор	А.М. Камачкин,	г. С.-Петербург,	Россия,
д.ф.-м.н., профессор	Н.Д. Кузьмичев,	г. Саранск,	Россия,
д.ф.-м.н., профессор	Е.Б. Кузнецов,	г. Москва,	Россия,
д.ф.-м.н., профессор	С.И. Мартынов,	г. Сургут,	Россия,
д.ф.-м.н., профессор	Н.Д. Морозкин,	г. Уфа,	Россия,
д.ф.-м.н., профессор	О.В. Починка,	г. Н. Новгород,	Россия,
д.ф.-м.н., профессор	И.П. Рязанцева,	г. Н. Новгород,	Россия,
академик АН Р.			
Узбекистан,	Ш.А. Алимов,	Kuala Lumpur,	Malaysia,
д.ф.-м.н., профессор			
д.ф.-м.н., профессор,	П.П. Матус,	г. Люблин,	Польша,
д.ф.-м.н., профессор	Т.Ш. Кальменов,	г. Алматы,	Казахстан.
д.ф.-м.н., профессор	Л.И. Каранджулов,	г. София,	Болгария,
PhD in Mathematics,	К.С. Проданова,	г. София,	Болгария,
к.ф.-м.н., профессор	Д. В. Тураев,	London,	United Kingdom,
			France.
д.ф.-м.н., профессор	А.А. Глуцюк,	Lion,	

Ученый секретарь:

Е. Е. Пескова, к. ф.-м. н., доцент кафедры прикладной математики, дифференциальных уравнений и теоретической механики Национального исследовательского Мордовского государственного университета им. Н.П. Огарёва (г. Саранск).

СОДЕРЖАНИЕ

ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

Александрова А.А., Коледина К.Ф. Многомерная оптимизация процесса алкилирования в среде RStudio	14
Алексеева В.А., Коледина К.Ф. Задача кластеризации в моделировании состава смеси каталитического риформинга бензина	15
Андреев А.С., Колегова Л.В. Об управлении движением шестизвенного манипулятора	18
Андреев А.С., Перегудова О.А. О принципе квазиинвариантности для неавтономных уравнений	20
Арефьев И.А., Еникеева Л.В., Агзамова М.Р. Математическое моделирование процесса сернокислотного алкилирования изобутана олефинами	23
Багмутов А.С., Попов И.Ю. Классификация связанных состояний для соединенных проводящих слоёв	26
Bibilo Yu., Glutsyuk A. Dynamical systems on T^2 modeling Josephson junction isomonodromic deformations and Painlevé 3 equations	29
Бойков И. В., Рязанцев В. А. Приближенные методы решения обратных задач геофизики	30
Босоногова М.В., Пескова Е.Е., Язовцева О.С. Исследование устойчивости кинетической модели химической реакции	32
Буранов Ж.И., Хусанов Д.Х. Вектор-функции Ляпунова в задаче об устойчивости неавтономной системы с цилиндрическим фазовым пространством	35
Веселова Е.А., Дерюгин Ю.Н., Ктиторов В.М. Численное моделирование распространения ударных волн на подвижных неструктурированных сетках по методике ЛОГОС-волна	39
Гринес В.З. О топологии многообразий, допускающих каскады с гиперболическими неблуждающим множеством	41
Гринес В.З., Минц Д.И. О топологической структуре несущих поверхностей для A -диффеоморфизмов с одномерными аттракторами и репеллерами	43
Гринес В.З., Минц Д.И., Петрова Ю.Э. О бифуркациях в однопараметрических семействах диффеоморфизмов, приводящих к рождению одномерных базисных множеств	45

Гришанов Е.Н., Грязева О.С. Численное исследование спектральных свойств периодического массива квантовых точек с гексагональной решёткой, помещённого в однородное магнитное поле	47
Джамалов С.З., Ашуров Р.Р., Туракулов Х.Ш. Об одной полунелокальной краевой задаче для трехмерного уравнения Трикоми в призматической неограниченной области	50
Донцова М.В. Достаточные условия разрешимости системы квазилинейных уравнений первого порядка со свободными членами	53
Дубовцев Д.А., Еникеева Л.В. Моделирование процесса синтеза метил-трет-бутилового эфира	55
Журавлев В.М., Морозов В.М. Условия роста периодических структур под облучением в модели «Быстрая релаксация-медленная диффузия»	57
Загидуллин Ш.Г., Коледина К.Ф. Обратная кинетическая задача при моделировании кинетики гидрирования полициклических ароматических углеводов	61
Кирейчева Е.Ю., Веселова Е.А., Дерюгин Ю.Н., Мамедова Т.Ф. О численном моделировании формирования сферического слоя D-T смеси в микромишенях ЛТС	63
Kuznetsov E.V., Leonov S.S. Modeling the behavior of a bar under creep conditions and under finite deformations	65
Кузьмичев Н.Д., Данилова Е.В., Васютин М.А. Математическое моделирование распределения температуры внутри пленки нитрида ниобия на основе двумерного уравнения теплопроводности	68
Кузьмичев Н.Д., Шушпанов А.А., Васютин М.А., Лапшина Е.А. Математическое моделирование пик-эффекта в осесимметричных жестких сверхпроводниках	72
Ладонкина М.Е., Повещенко Ю.А., Ми Синь Исследование устойчивости семейства двухслойных ПКРС с адаптивной вязкостью	76
Ладонкина М.Е., Повещенко Ю.А., Рагимли О.Р., Чжан Хаочэнь Теоретический анализ полностью консервативных разностных схем с адаптивной вязкостью	80
Литвинов В.Л., Литвинова К.В. Математическое моделирование нелинейных колебаний стержня переменной длины	83
Лытаев А.А., Попов И.Ю. Применение теории связанных волноводов для моделирования переключателей для CNOT вентилей	85
Мазитов А.А., Губайдуллин И.М. Математическое моделирование нестационарного течения однофазного потока в пористых коллекторах	89

Махмутова Д.Ф., Еникеева Л.В. Моделирование реакции сернокислотного алкилирования изобутанов олефинами методом роя частиц и генетическим алгоритмом	91
Мизхер У.Д., Ковальногов В.Н., Вельмисов П.А. Математическое моделирование закрученной струи в приложениях к малоэмиссионному сжиганию низкосортных топлив	93
Морозов К.Е. О прохождении инвариантного тора через вырожденную резонансную зону при квазипериодическом возмущении гамильтоновой системы	96
Мугалимова Р.С., Коледина К.Ф. Математическое моделирование процесса каталитического синтеза трет-бутиловых эфиров с применением цеолитных катализаторов с учётом процесса диффузии	98
Муфтахов И.Р., Карамов Д.Н., Жуков А. В. Об одной математической модели интегрированной энергетической системы на основе уравнений Вольтерра с разрывным ядром	102
Онегов Н.А. К вопросу о моделировании внутренних волн в газонефтяном пласте	104
Пашуткин Д.В. Об одном необходимом условии приводимости линейных систем дифференциальных уравнений	106
Рассадин А.Э. Касание по Чернову и автопредставление ограниченных функций	108
Смолкина М.О., Попов И.Ю., Блинова И.В. Свойства баллистического электронного транспорта в системе из двух сцепленных колец, находящейся в магнитном поле	111
Соловарова Л.С., Фьонг Т.Д. О численном решении дифференциально-алгебраических уравнений второго порядка	113
Сыромясов А.О., Понкротова Ю.В., Меньшакова Т.В. О погрешности расчета температурного поля в плоской среде с включениями	115
Тамарова Ю.А., Вельмисов П.А., Алексанин Н.Д., Нуруллин Н.И. Исследование динамических процессов в системах измерения давления газожидкостных сред	118
Фалеева М.П., Попов И.Ю. Исследование модели реализации алгоритма квантового распределения ключей в турбулентной атмосфере	122
Фасхутдинова Р.И. Численный анализ жестких систем дифференциальных уравнений в химической кинетике	125
Чилина Е.Е. Нахождение полных характеристик периодических автоморфизмов двумерного тора	127

Шаманаев П.А.

К вопросу о периодических решениях линейных неоднородных дифференциальных уравнений с двумя малыми параметрами 130

Яшин Е.Е., Мамедова Т.Ф., Кирдяшова Е.В.

Математическое моделирование процесса воздействия цифровой среды на молодежь 132

КРАТКИЕ СТАТЬИ

Афиногентова Е. В.

Корректность метода линеаризации дискретной системы в одном критическом случае 134

Губайдуллин И.М.

Многофазные и многоуровневые математические модели и высокопроизводительные алгоритмы отечественных междисциплинарных программных комплексов нефтедобычи, нефтепереработки и нефтехимии 139

Казанков В.К., Холодова С.Е.

Математическое моделирование геофизических процессов в слое электропроводящей жидкости переменной глубины 149

Маннанова Г.И., Бикбова Г.Р., Губайдуллин И.М., Коледина К.Ф.

Применение 16-компонентной кинетической модели каталитического крекинга для оценки активности катализаторов 156

Мартынов С.И., Ткач Л.Ю.

Гидродинамический механизм перемещения микро-/наномотора с магнитным приводом 168

Мурсалова М.Б., Касумов Т.М.

Об одной краевой задаче для дифференциального уравнения с частными производными четвертого порядка с нелокальными условиями 180

Федоров Е.Г., Попов И.Ю.

Динамическое поведение для группы биологических нейронов ФитцХью-Нагумо 190

Юрова Т.С., Попов И.Ю.

Исследование резонансов в акустической модели клетки 204

CONTENTS

ABSTRACTS

A.A. Alexandrova, K.F. Koledina

Multidimensional optimization of the alkylation process in the RStudio environment 14

V.A. Alekseeva, K.F. Koledina

Clustering problem in modeling the composition of a mixture of catalytic reforming of gasoline 15

Andreev A.S., Kolegova L.V.

On the motion control of a six-link manipulator 18

Andreev A.S., Peregudova O.A.

On the quasi-invariance principle for non-autonomous equations 20

I.A. Arefyev, L.V. Enikeeva, M.R. Agzamova

Mathematical modeling of the process of sulfuric acid alkylation of isobutane with olefins ... 23

A.S. Bagmutov, I.Yu. Popov

Classification of bound states for connected layers 26

Yu. Bibilo, A. Glutsyuk

Dynamical systems on T^2 modeling Josephson junction isomonodromic deformations and Painlevé 3 equations 29

I.V. Boykov, V.A. Ryazantsev

Approximate methods for solving inverse geophysical problems 30

M.V. Bosonogova, E.E. Peskova, O.S. Yazovtseva

Investigation of the stability of the chemical reaction's kinetic model 32

J.I. Buranov, D.Kh. Khusanov

Lyapunov vector-functions in the stability problem of a non-autonomous system with a cylindrical phase space 35

E.A. Veselova, Yu.N. Deryugin, V.M. Ktitorov

Numerical simulation of the propagation of shock waves on moving unstructured grids using the LOGOS-wave technique 39

V.Z. Grines

On the topology of manifolds admitting cascades with hyperbolic non-wandering sets 41

V.Z. Grines, D.I. Mints

On the topological structure of ambient surfaces for A -diffeomorphisms with one-dimensional attractors and repellers 43

V.Z. Grines, D.I. Mints, Y.E. Petrova

On bifurcations in one-parameter families of diffeomorphisms that lead to the generation of one-dimensional basic sets 45

E.N. Grishanov, O.S. Gryazeva Numerical Analysis of the Spectral Properties of Quantum Dots Array with Hexagonal Lattice in a Uniform Magnetic Field	47
S.Z. Dzhamalov, R.R. Ashurov, Kh.Sh. Turakulov On a semi-nonlocal boundary value problem for the three-dimensional Tricomi equation in a prismatic unbounded domain	50
M.V. Dontsova Sufficient conditions of a solvability for a system of quasilinear equations of the first order with constant terms	53
D.A. Dubovtsev, L.V. Enikeeva Optimization of the synthesis process of methyl tert-butyl ether by developing a mathematical model	55
V.M. Zhuravlev, V.M. Morozov Conditions for the growth of periodic structures under irradiation in the «Fast relaxation-slow diffusion» model	57
Sh.G. Zagidullin, K.F. Koledina Inverse kinetic problem in modeling the kinetics of hydrogenation of polycyclic aromatic hydrocarbons	61
E.Yu. Kireicheva, E.A. Veselova, Yu.N. Deryugin, T.F. Mamedova About numerical modeling of the formation of a spherical layer of D-T mixtures in LTS micro-targets	63
E.B. Kuznetsov, S.S. Leonov Modeling the behavior of a bar under creep conditions and under finite deformations	65
N.D. Kuzmichev, E.V. Danilova, M.A. Vacutin Mathematical modeling of the temperature distribution inside the niobium nitride membrane based on the two-dimensional heat conduction equation	68
N.D. Kuzmichev, A.A. Shushpanov, M.A. Vasyutin, E.A. Lapshina Mathematical modeling of the pic-effect of spheroid of hard superconductors	72
M.E. Ladonkina, Yu.A. Poveschenko, Mi Xin Study on the stability of two-layer completely conservative difference scheme family with adaptive viscosity	76
M.E. Ladonkina, Yu.A. Poveschenko, O.R. Ragimli, H. Zhang Theoretical Analysis of Fully Conservative Difference Schemes with Adaptive Viscosity ...	80
V.L. Litvinov, K.V. Litvinova Mathematical modeling of nonlinear vibrations of a rod of variable length	83
A.A. Lytaev, I.Yu. Popov Application of the coupled mode theory for simulation of switchers for CNOT gates	85
A.A. Mazitov, I.M. Gubaydullin Mathematical modeling of unsteady single-phase flow in porous reservoirs	89
D.F. Makhmutova, L.V. Enikeeva Modeling the reaction of sulfuric acid alkylation of isobutanes with olefins by the particle	

swarm method and genetic algorithm	91
U.J. Mizher, V.N. Kovalnogov, P.A. Velmisov Mathematical modeling of a swirling jet in applications to low-emission combustion of low-grade fuels	93
K.E. Morozov On the passage of an invariant torus through a degenerate resonance zone in a nearly Hamiltonian system under quasiperiodic perturbations	96
R.S. Mugalimova, K.F. Koledina Mathematical modeling of the process of catalytic synthesis of tert-butyl esters using zeolite catalysts, taking into account the diffusion process	98
I.R. Muftahov, D.N. Karamov, A.V. Zhukov On one mathematical model of an integrated energy system based on the Volterra equations with discontinuous kernels	102
N.A. Onegov Modeling of internal waves in the gas and oil reservoir	104
D.V. Pashutkin On a necessary condition for the reducibility of linear systems of differential equations	106
A.E. Rassadin The Chernoff tangency and the autorepresentation of bounded functions	108
M.O. Smolkina, I.Yu. Popov, I.V. Blinova Ballistic Electronic Transport Properties in a System of Two Chained Orthogonal Rings	111
L.S. Solovarova, Ta Duy Phuong On the numerical solution of differential-algebraic equations of the second order	113
A.O. Syromyasov, Yu.V. Ponkratova, T.V. Menshakova On the error of calculation of the temperature field in plane medium with inclusions	115
Yu.A. Tamarova, P.A. Velmisov, N.D. Aleksanin, N.I. Nurullin Investigation of dynamic processes in pressure measurement systems for gas-liquid media ...	118
M.P. Faleeva, I.Yu. Popov Analysis of the quantum key distribution algorithm implementation model in turbulent atmosphere	122
R.I. Faskhutdinova Numerical analysis of stiff systems of differential equations in chemical kinetics	125
E.E. Chilina Finding complete characteristics of periodic automorphisms of the two-dimensional torus ...	127
P.A. Shamanaev On the question of periodic solutions of linear inhomogeneous differential equations with two small parameters	130
E.E. Yashin, T.F. Mamedova, E.V. Kirdyashova Mathematical modeling of the process of impact of the digital environment on young people ..	132

SHORT PAPERS

E. V. Afinogentova

Correctness of the linearization method for the discrete system in one critical case 134

I.M. Gubaydullin

Multiphase and multilevel mathematical models and high-performance algorithms of domestic interdisciplinary software systems for oil production, oil refining and petrochemistry 139

V.K. Kazankov, S.E. Kholodova

Mathematical modeling of geophysical processes in a layer of an electrically conducting liquid of variable depth 149

G.I. Mannanova, G.R. Bikbova, I.M. Gubaydullin, K.F. Koledina

Application of a 16-component kinetic model of catalytic cracking to evaluate the activity of catalysts 156

S.I. Martynov, L.Yu. Tkach

Hydrodynamic mechanism of movement of micro-/nanomotor with magnetic drive 168

M.B. Mursalova, T.M. Kasimov

On a Boundary Value Problem for the fourth-order partial differential equation with the non-local conditions 180

E.G. Fedorov, I.Y. Popov

Dynamic behavior for a group of biological neurons FitzHugh-Nagumo 190

T.S. Yurova, I.Y. Popov

Investigation of resonances in the acoustic model of the cell 204

УДК 622.24.051

Многомерная оптимизация процесса алкилирования в среде RStudio

Александрова А. А.¹, Коледина К. Ф.^{1,2}

Уфимский государственный нефтяной технический университет¹,
Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН²

В данной работе рассматривается актуальная во многих сферах науки и повседневной жизни задача многокритериальной оптимизации. В качестве объекта исследования выбран процесс алкилирования. Решение задачи производится на основе математической модели процесса алкилирования в среде программирования RStudio. Многомерная оптимизация подразумевает собой поиск экстремума двух критериев данного процесса при соблюдении ограничений. По заключению работы было проведено сравнение результатов, полученных разными методами.

Математическая модель процесса алкилирования для расчета прибыли разработана в работе [1]. Данную задачу оптимизации рассматриваем как многокритериальную, добавив к максимизации прибыли минимизацию изобутанового сырья [2].

Для решения прикладной задачи нефтехимии использовали средства среды программирования RStudio [3]. Применяются такие методы, как метод идеальной точки, метод свертки, метод лексико-графического упорядочивания.

Литература

1. Koledina K.F. Multi-objective optimization of chemical reaction conditions based on a kinetic model / K. F. Koledina, S. N. Koledin, A. P. Karpenko, I. M. Gubaydullin, M. K. Vovdenko // Journal of Mathematical Chemistry February. 2019. Vol. 57, Issue 2. pp. 484–493.
2. Sauer R. N. Computer Points the Way to More Profits / R. N. Sauer, Jr. Colville, C. W. Burwick // Hydrocarbon Processing and Refiner. 1964. Vol. 49, No. 2. pp. 84-92.
3. Язык и среда программирования R: учеб. пособие / А.В, Золотарюк. - М. Инфра-М, 2018. 162 с.

MSC2020 34G10 58D25

Multidimensional optimization of the alkylation process in the RStudio environment

A. A. Alexandrova¹, K. F. Koledina^{1,2}

Ufa State Petroleum Technological University¹,
Institute of Petrochemistry and Catalysis of the Russian Academy of Sciences²

УДК 004.622

Задача кластеризации в моделировании состава смеси каталитического риформинга бензина*

Алексеева В. А.¹, Коледина К. Ф.^{1,2}

Уфимский государственный нефтяной технический университет¹,
Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН²

Одной из актуальных задач моделирования процесса каталитического риформинга бензина является анализ октановых чисел углеводородов методами кластеризации на основе промышленных данных с целью группировки индивидуальных компонент для последующего моделирования и оптимизации процесса. Кластеризация заключается в разбиении заданной выборки на непересекающиеся подмножества (кластеры) по принципу схожести объектов.

Для решения данной задачи использована задача кластеризации двумя алгоритмами машинного обучения – алгоритмом иерархической кластеризации и алгоритмом K-Means.

Первым этапом работы является группирование углеводородов (УВ) по значениям октановых чисел (ОЧ) с последующим анализом полученных групп по классу УВ и числу атомов в структуре молекулы с использованием данных в форме таблицы УВ с характеристиками. Далее было проведено сравнение с принятой группировкой [1]. Данные методы и результаты группировки могут в дальнейшем использоваться при моделировании каталитического риформинга бензина.

Результат кластеризации двумя алгоритмами только для олефинов с числом атомов углерода 7 приведен в таблице 1, для изопарафинов с числом атомов углерода 8 – в таблице 2.

Таблица 1. Результат решения задачи кластеризации олефинов с числом атомов углерода 7.

Наименование УВ	Число атомов углерода	ОЧ	Номер группы по алгоритму иерархической кластеризации	Номер группы по алгоритму K-Means
5-метилгексен-1	7	43,47	2	3
2-метил- <i>t</i> -гексен-3	7	34,38	2	3
2-этил-3-метилбутен-1	7	43,47	2	3
О-с7-9	7	90,36	4	2
О-с7-10	7	90,36	4	2
О-с7-11	7	90,36	4	2
О(di)-с7-4	7	90,36	4	2

*Работа выполнена по теме «Разработка новых теоретических подходов и программного обеспечения для моделирования сложных химических процессов и поиска соединений с заданными физико-химическими свойствами» (Регистрационный номер: АААА-А19-119022290011-6).

Продолжение таблицы 1.

О-с7-14	7	90,36	4	2
с-гептен-3	7	34,38	2	3
2-метил-2-гексен	7	34,38	2	3
3-метил-с-гексен-3	7	34,38	2	3
t-гептен-3	7	34,38	2	3
3-этилпентен-2	7	34,38	2	3
1,5-диметилциклопентен	7	34,38	2	3
O(di)-с7-3	7	90,36	4	2
О-с7-13	7	90,36	4	2

Таблица 2. Результат решения задачи кластеризации изопарафинов с числом атомов углерода 8.

Наименование УВ	Число атомов углерода	ОЧ	Номер группы по алгоритму иерархической кластеризации	Номер группы по алгоритму K-Means
2,2,4-триметилпентан	8	90,36	4	2
2,2-диметилгексан	8	34,38	2	3
2,2,3-триметилпентан	8	34,38	2	3
2,5-диметилгексан	8	34,38	2	3
2,4-диметилгексан	8	34,38	2	3
3,3-диметилгексан	8	34,38	2	3
2,3,4-триметилпентан	8	34,38	2	3
2-метил-3-этилпентан	8	188,36	5	6
I-с8-1	8	188,36	5	6
3,4-диметилгексан	8	16,15	2	3
3-метилгептан	8	16,15	2	3
3-этилгексан	8	25,18	2	3
2-метилгептан	8	16,15	2	3
2,3-диметилгексан	8	188,36	5	6

Согласно результатам, приведенным в таблицах 1 и 2, олефины с числом атомов углерода 7 необходимо рассматривать при моделировании процесса не как одну, а как две группы, так как значения ОЧ сильно отличаются. Изопарафины с числом атомов углерода 8, которые ранее рассматривались как одна группа [1], необходимо декомпозировать на три.

Кроме того, анализ результатов кластеризации показал, что такие группы как олефины, ароматика, изопарафины, нафтены 5-ти членные и 6-ти членные нафтены необходимо делить на 2 или даже 3 класса по октановым числам. Данная группировка углеводородов может применяться при математическом моделировании кинетики процесса каталитического риформинга бензинов, с целью решения задачи оптимизации условий процесса для максимизации ОЧ продукта и минимизации выхода ароматических углеводородов.

Литература

1. Iranshahi D., Amiri H., Karimi M. Modeling and Simulation of a Novel Membrane Reactor in a Continuous Catalytic Regenerative Naphtha Reformer Accompanied with a Detailed Description of Kinetics // Energy Fuels. 2013. No. 27. pp. 4048.
2. Белоусов Р. Л., Дрожжин Н. А., Костенчук М. И. Построение нечетких лингвистических переменных с использованием методов кластерного анализа данных // Журнал Прикладная информатика. 2015. Т. 10. № 1. (55). С. 98-105.

MSC2020 92E99

Clustering problem in modeling the composition of a mixture of catalytic reforming of gasoline

V. A. Alekseeva¹, K. F. Koledina^{1,2}

Ufa State Petroleum Technological University¹,
Institute of Petrochemistry and Catalysis of the Russian Academy of Sciences²

УДК 531.36

Об управлении движением шестизвенного манипулятора*

Андреев А.С.¹, Колегова Л.В.¹

Ульяновский государственный университет¹

Широкое применение робототехнических систем в различных областях промышленности вызвало интенсивные исследования по обоснованию методов конструирования структур управления роботами-манипуляторами. Одной из важных и весьма актуальных проблем в этих исследованиях остается построение структуры управления, обеспечивающего стабилизацию программного движения на основе обратной связи с неполным измерением, особенно, с измерением только фазовых координат, без измерения скоростей. Важность этой проблемы состоит в том, что установка датчиков скоростей не всегда возможна и требует дополнительных затрат, а их функционирование сопровождается шумами в измерении. Актуальность проблемы состоит в том, что для ее решения требуется разрабатывать и использовать новые методы моделирования и анализа построенных моделей. Из многочисленных работ в этой области отметим работы [1, 2] с использованием наблюдателей для оценки скоростей, работы [3–10] с использованием фильтров первого порядка, работы [11, 12] на основе адаптивного управления. Основным математическим аппаратом в решении этих задач является теорема Ляпунова об асимптотической устойчивости с подбором соответствующей функции Ляпунова.

В работах [13, 14] предложен новый подход к построению моделей управления роботами-манипуляторами без измерения скоростей на основе нелинейного ПИ-регулятора при помощи обратной связи с запаздыванием. Этот подход потребовал соответствующего моделирования посредством функционально-дифференциальных уравнений и применения нового метода исследования асимптотической устойчивости этих уравнений и новой методики построения функционала Ляпунова.

В работе рассматривается задача о стабилизации без измерения скоростей программного движения шестизвенного манипулятора с цилиндрическими и призматическим шарнирами. Эта задача решается на основе указанных работ [13, 14].

Литература

1. Berghuis H., Nijmeijer H. A passivity approach to control-observer design for robots // IEEE Transactions on Robotics and Automation. 1993. No. 9. pp. 740-754.
2. Nicosia S., Tomei P. Robot control by using only joint position measurements // IEEE Transactions on Automatic Control, 1990, 35, pp. 1058–1061.
3. Andreev A. S., Peregodova O. A. Trajectory tracking control for robot manipulators using only position measurements // International Journal of Control, 2017. DOI: 10.1080/00207179.2017.1397755
4. Andreev A., Peregodova O., Sutyrkina K. Trajectory Tracking Control of Robot Manipulators with Revolute Joints using Only Position Measurements // 2018 18th

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 20-31-90120).

- International Conference on Mechatronics -Mechatronika (ME), Brno, Czech Republic, 2018. pp. 1-6.
5. Loria A. Global tracking control of one degree of freedom Euler-Lagrange systems without velocity measurements // European journal of control, 1996, 2, pp. 144-151.
 6. Loria A. Observers are unnecessary for output-feedback control of Lagrangian Systems // IEEE Transactions on Automatic Control, Institute of Electrical and Electronics Engineers. 2016. Vol. 61. pp. 905–920.
 7. Moreno-Valenzuela J., Santibanez V., Campa R. On output feedback tracking control of robot manipulators with bounded torque input // International Journal of Control, Automation, and Systems. 2008. No. 6. pp. 76-85.
 8. Oliveira T. R., Peixoto A. J., Hsu L. Global tracking for a class of uncertain nonlinear systems with unknown sign-switching control direction by output feedback // International Journal of Control. 2015. Vol. 88. pp. 1895-1910.
 9. Romero J. G., Sarras I., Ortega R. A globally exponentially stable tracking controller for mechanical systems using position feedback // American Control Conference, Washington, DC, USA, 2013. pp. 4976-4981.
 10. Peregudova O. Robust Trajectory Tracking Control for Robot Manipulators without Velocity Measurements // Stability and Oscillations of Nonlinear Control Systems (Pyatnitskiy's Conference), 2018 International conference, IEEE Xplore. DOI: 10.1109/STAB.2016.7541115
 11. Colbaugh R., Glass K., Barany E. Adaptive regulation of manipulators using only position measurements // The International Journal of Robotics Research. 1997. Vol. 16. pp. 703-713.
 12. Yarza A., Santibanez V., Moreno-Valenzuela J. An adaptive output feedback motion tracking controller for robot manipulators: uniform global asymptotic stability and experimentation // International Journal of Applied Mathematics and Computer Science. 2013. Vol. 23. pp. 599-611.
 13. Andreev A. S., Peregudova O. A. Stabilization of the preset motions of a holonomic mechanical system without velocity measurement // Journal of Applied Mathematics and Mechanics. 2017. Vol. 81, No. 2. pp. 95-105.
 14. Andreev A., Peregudova O., Kolegova L. On the Output Position Feedback Controller of a Serial Robot Manipulator // 2020 2nd International Conference on Control Systems, Mathematical Modeling, Automation and Energy Efficiency (SUMMA), 2020. pp. 117-120, doi: 10.1109/SUMMA50634.2020.9280650.

MSC2020 34D20

On the motion control of a six-link manipulator

Andreev A.S.¹, Kolegova L.V.¹

Ulyanovsk State University¹

УДК 531.36

О принципе квазиинвариантности для неавтономных уравнений*

Андреев А.С.¹, Перегудова О.А.¹

Ульяновский государственный университет¹

Широкое использование релейных регуляторов для технических устройств и процессов привело к необходимости разработки качественной теории дифференциальных уравнений с разрывной правой частью [1–5]. Проблеме устойчивости решений таких уравнений посвящено множество исследований. Выделим основные, на наш взгляд, публикации, посвященные решению данной проблемы в направлении исследования представленной статьи. В статьях [3, 6–9] рассматриваются различные аспекты обобщения классических теорем Ляпунова для уравнений с разрывной правой частью и дифференциальными включениями. Теорема об асимптотической устойчивости таких уравнений в автономном случае доказана в [10] для случая, когда существует функция Ляпунова со знакопостоянной производной по времени.

В статьях [11–14] доказаны теоремы о применении функции Ляпунова с полуопределенной производной по времени к проблеме асимптотической устойчивости неавтономных дифференциальных уравнений с разрывной правой частью.

Развитие прямого метода Ляпунова в терминах использования знакопостоянных функций Ляпунова при исследовании устойчивости непрерывных неавтономных дифференциальных уравнений [15–17] позволило получить новые методы решения задачи управления движением механических систем [18–20].

Целью нашего исследования является получение новых результатов в направлении, представленном в [11, 12, 21–28], и решение на их основе задач применения релейных законов управления для стабилизации установившихся движений управляемых механических систем.

В докладе представлено решение задачи стабилизации установившихся движений голономной механической системы с помощью релейных законов управления. Это решение достигается путем доказательства новых теорем об асимптотической устойчивости решения дифференциального уравнения с разрывной правой частью. Новизна теорем основана на построении предельных включений и использовании знакопостоянных функций Ляпунова. В качестве примера, решена задача о стабилизации установившегося движения пятизвенового робота-манипулятора с помощью релейного управления.

Литература

1. Aizerman M. A., Pyatnitskii E. S. Foundations of a theory of discontinuous systems. I // Automat. Remote Control. 1974. Vol. 35, No. 7, part 1, pp. 1066-1079.
2. Davy J. L. Properties of solution set of a generalized differential equation // Bull. Austral. Math. Soc. 1972. Vol. 6. pp. 379-398.
3. Filippov A. F. Differential Equations with Discontinuous Right-Hand Side. Dordrecht, the Netherlands: Kluwer, 1988.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проекты № 19-01-00791 а, 18-41-730022 р а).

4. Iannelli L., Johansson K. H., Jonsson U. T., Vasca F. Averaging of Nonsmooth Systems Using Dither // *Automatica*. 2006. Vol. 42, No. 4. pp. 669-676.
5. Utkin V. I. *Sliding Modes in Control Optimization*. Berlin: Springer-Verlag, 1992.
6. Aubin J. P., Cellina A. *Differential Inclusions*. Springer, 1984.
7. Kamalapurkar R., Dixon W. E., Teel A. R. On reduction of differential inclusions and Lyapunov stability // 2017 IEEE 56th Annual Conference on Decision and Control (CDC), Melbourne, VIC. 2017. pp. 5499-5504.
8. Roxin E. Stability in general control systems // *Journal of Differ. Equat.* 1965. Vol. 1, No. 2. pp. 115-150.
9. Ryan E. An integral invariance principle for differential inclusions with applications in adaptive control // *SIAM J. Control Optim.* 1998. Vol. 36. No. 3. pp. 960-980.
10. Alimov Yu. I. On the application of Lyapunov's direct method to differential equations with ambiguous right sides // *Autom. Remote Control*. 1961. Vol. 22. No. 7. pp. 713-725.
11. Андреев А. С., Дмитриева О. Г., Петровичева Ю. В. Об устойчивости нулевого решения системы с разрывной правой частью // *Научно-технический вестник Поволжья*. 2011. № 1. С. 15-20.
12. Андреев А. С., Перегудова О. А. Вектор-функции Ляпунова в задачах о стабилизации движений управляемых систем // *Журнал Средневолжского математического общества*. 2014. Т. 16, № 1. С. 32-44.
13. Finogenko I. A. Limit differential inclusions and the invariance principle for nonautonomous systems // *Sib. Math. J.* 2014. Vol. 55. pp. 372-386.
14. Finogenko I. A. Method of limit differential equations for nonautonomous discontinuous systems // *Dokl. Math.* 2016. Vol. 93. pp. 9-12.
15. Андреев А. С. Об асимптотической устойчивости и неустойчивости нулевого решения неавтономной системы // *Прикладная математика и механика*. 1984. Т. 48, Вып. 2. С. 225-232.
16. Andreev A. S., Peregudova O. A. On the method of comparison in asymptotic-stability problems // *Doklady Physics*. 2005. Vol. 50, No. 2. pp. 91-94.
17. Andreyev A. S., Peregudova O. A. The comparison method in asymptotic stability problems // *Journal of Applied Mathematics and Mechanics*. 2006. Vol. 70, No. 6. pp. 865-875.
18. Andreev A. S., Peregudova O. A. Stabilization of the preset motions of a holonomic mechanical system without velocity measurement // *Journal of Applied Mathematics and Mechanics*. 2017. Vol. 81, No. 2. pp. 95-105.
19. Андреев А. С., Перегудова О. А. О стабилизации программных движений голономной механической системы // *Автоматика и телемеханика*. 2016. № 3. С. 66-80.
20. Andreev A. S., Peregudova O. A. On global trajectory tracking control of robot manipulators in cylindrical phase space // *International Journal of Control*. 2020. Vol. 93, No. 12. pp. 3003-3015.

21. Andreev A., Peregudova O. Relay Controllers in the Motion Stabilization Problems of Mechanical Systems with Cyclic Coordinates," 2020 24th International Conference on System Theory, Control and Computing (ICSTCC). 2020. pp. 433-438, doi: 10.1109/ICSTCC50638.2020.9259654.
22. Artstein Z. Topological dynamics of ordinary differential equations // J. Differ. Equations. 1977. Vol. 23, No. 2. pp. 216-223.
23. Wakeman D. An application of topological dynamics to obtain a new invariance property for nonautonomous ordinary differential equations // J. Differential Eqns. 1975. Vol. 17. pp. 259-295.
24. Sell G. Topological Dynamics and Ordinary Differential Equations, New York: Van Nostrand Reinhold, 1971.
25. Rouche N., Habets P., Laloy M. Stability Theory by Liapunov's Direct Method. New York: Springer, 1977.
26. Карапетян А. В. Устойчивость стационарных движений, М.: УРСС, 1998.
27. Routh E. J. The advanced part of a treatise on the dynamics of a system of rigid bodies. London: MacMillan and Co., 1884.
28. Andreev A., Peregudova O. On the Steady State Motions Control Problem for Mechanical Systems with Relay Controllers // Syst. Theor. Control Comput. J. 2021. Vol. 1, No. 1. pp. 48-55.

MSC2020 34D20

On the quasi-invariance principle for non-autonomous equations

Andreev A.S.¹, Peregudova O.A.¹
Ulyanovsk State University¹

УДК 66.011

Математическое моделирование процесса сернокислотного алкилирования изобутана олефинами

Арефьев И. А.¹, Еникеева Л. В.², Агзамова М. Р.³

Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН¹,
Новосибирский государственный университет²,
Уфимский государственный нефтяной технический университет³

Целью данной работы является разработка математической модели сернокислотного алкилирования изобутана олефинами с учетом физико-химических закономерностей протекания процесса. Выявлены значимые особенности технологии, которые необходимо учесть при моделировании процесса. Рассмотрены варианты схем химических превращений в процессе сернокислотного алкилирования изобутана олефинами. Вероятность протекания всех реакций оценена по значению энергии Гиббса. Заложены основы для дальнейшего моделирования всего химико-технологического процесса и решения задач многоцелевой оптимизации процесса.

В настоящее время в мировом производстве автомобильных бензинов наблюдается постоянная тенденция к ужесточению эксплуатационных, а также экологических характеристик топлива. Международные и отечественные нормативы существенно ограничивают содержание ароматических углеводородов, бензола, олефинов и серы в топливе. Назначением сернокислотного алкилирования изобутана олефинами является производство высокооктанового компонента бензина – алкилата [1].

Алкилату свойственно высокое октановое число. Для него оно составляет 96 по исследовательскому методу и 92 по моторному методу. Кроме того, к его преимуществам следует отнести нетоксичность продуктов алкилирования. Низкое давление насыщенных паров и отсутствие бензола позволяют минимизировать его потери при хранении и транспортировке, поскольку он не испаряется.

В настоящее время развитие науки и техники сделало возможным создание универсальных программных комплексов, позволяющих разрабатывать и исследовать модели промышленных процессов [2, 3]. При этом важно учитывать факт, что любая математическая модель химико-технологического процесса строится на физико-химической основе и учитывает термодинамику и химическую кинетику. Для успешного моделирования процесса необходимо тщательное изучение его химизма и составление детализированной кинетической модели.

Наиболее полный учет термодинамических и кинетических закономерностей целевых и побочных реакций при моделировании позволит с наибольшей степенью достоверности прогнозировать выход целевого продукта высокого качества [4, 5]. В дальнейшем такие модели могут быть использованы для поиска оптимальных технологических условий и интенсификации процесса.

В исследуемом процессе реакции протекают по карбоний-ионному механизму в присутствии серной кислоты. Термодинамический анализ выявил наиболее вероятные для этих условий реакции, оценка была проведена по значению энергии Гиббса ΔG . Итоговая схема представляет собой граф, состоящий из 12 компонентов и 15 стадий.

При моделировании стоит принять во внимание свойства кислотных катализаторов,

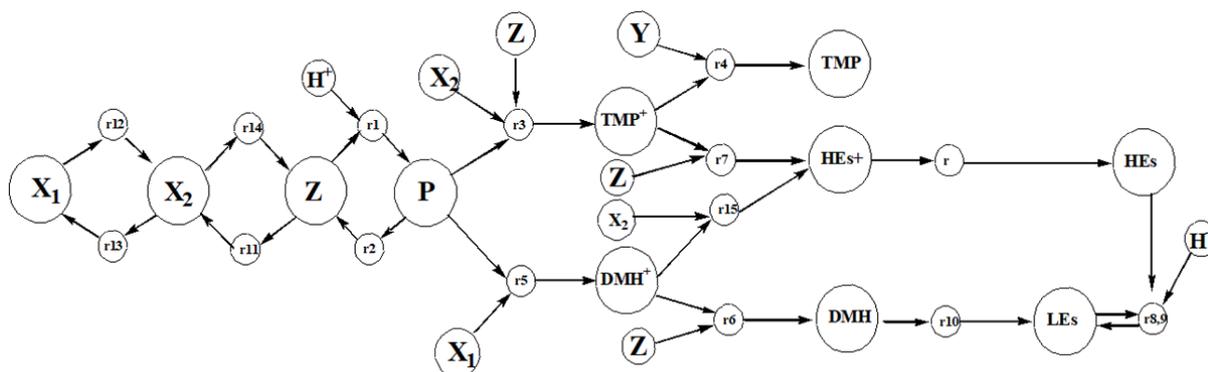


Рис. 1. Комбинированный граф реакций процесса сернокислотного алкилирования изобутана олефинами: X_1 – бутан-1; X_2 – бутан-2; Z – изобутилен; Y – изобутан; P – трет-бутил-катион; H^+ – протон водорода; TMP – триметилпентаны; DMH – диметилгексаны; HEs – тяжелые фракции; LEs – легкие продукты; $r1-15$ – реакции.

обладающих высокой коррозионной активностью и низкой селективностью, ведущей к тому, что наряду с целевыми реакциями алкилирования, протекает большое количество побочных реакций. Они приводят к потере активности и увеличению расхода катализатора, а также к образованию более легких и более тяжелых углеводородов, чем целевой продукт [1, 6].

Для определения констант скоростей реакций, протекающих в ходе процесса, был выбран метод DifferentialEvolutionBase, применяемый при решении задач оптимизации и моделирования путем последовательного подбора. Данный алгоритм выбран исходя из следующих преимуществ: не требуется производная информация, быстрота, эффективность, параллельные возможности расчета и оптимизация непрерывных многоцелевых задач. Решение обратной кинетической задачи определяется функционалом:

$$F = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^M [X_{ij}(exp) - X_{ij}(est)],$$

где N – количество параметров оптимизации, M – количество опытов, $X_{ij}(exp)$ – экспериментальное значение, $X_{ij}(est)$ – расчетное значение.

Количество параметров оптимизации составило 15 ($n = 15$).

Литература

1. Ахметов А.Ф. Технологии глубокой переработки нефти и газа / А.Ф. Ахметов. — Уфа.: НаукаГилем, 2002. 672 с.
2. Zainullin R.Z., Koledina K.F., Akhmetov A.F., Gubaidullin I.M. Kinetics of catalytic reforming of gasoline // Kinetics and catalysis. 2017. Vol. 59, No. 3. 292-303 p.
3. Зернов П.А., Мурзин Д.Ю., Парпуц О.И., Кузичкин Н.В. Моделирование процесса алкилирования изобутана бутиленами в аппарате реакционно-ректификационного типа // Химия и химические технологии. 2014. Т. 57, № 9. С. 100-104.
4. Слинко М.Г. История развития математического моделирования каталитических процессов и реакторов // Теоретические основы химической технологии. 2007. Т. 41, № 1. С. 16-34.

5. Cao P., Zheng, Sun L. W., Zhao L. Multiscale Modeling of Isobutane Alkylation with Mixed C4 Olefins Using Sulfuric Acid as Catalyst // Industrial and Engineering Chemistry Research. 2019.
6. Albright L.F., Wood K.V. Alkylation of isobutane with C3-C4 olefins: identification and chemistry of heavy-end products // Industrial and Engineering Chemistry. 1997. No. 36. pp. 2110-2112.

MSC2020 68W50

Mathematical modeling of the process of sulfuric acid alkylation of isobutane with olefins

I. A. Arefyev¹, L. V. Enikeeva², M. R. Agzamova³

Institute of Petrochemistry and Catalysis of the Russian Academy of Sciences¹,
Novosibirsk State University²,
Ufa State Petroleum Technological University³

УДК 530.145.61

Классификация связанных состояний для соединенных проводящих слоёв*

Багмутов А. С., Попов И. Ю.

Университет ИТМО

Для моделирования волноводов используются Лапласианы с граничными условиями Дирихле, заданные на бесконечных полосах и проводящих слоях разной размерности. В таких системах локальные деформации создают возможности для формирования связанных состояний, энергия которых зависит от параметров деформации. Примеры таких систем можно найти в [1–3]. В настоящей работе рассматривается случай двух параллельных трехмерных проводящих слоев, соединенных через окно, форма которого варьируется. Для подобных систем спектр был исследован в [4]. Нашей целью является обнаружение зависимостей энергии связанных состояний от формы окна с использованием модели Хартри-Фока и последующих численных расчетов. Полученные решения авторы классифицируют по количеству и типу зон знакопостоянства (нодальных областей), обобщая случай классической нодальной теоремы Куранта.

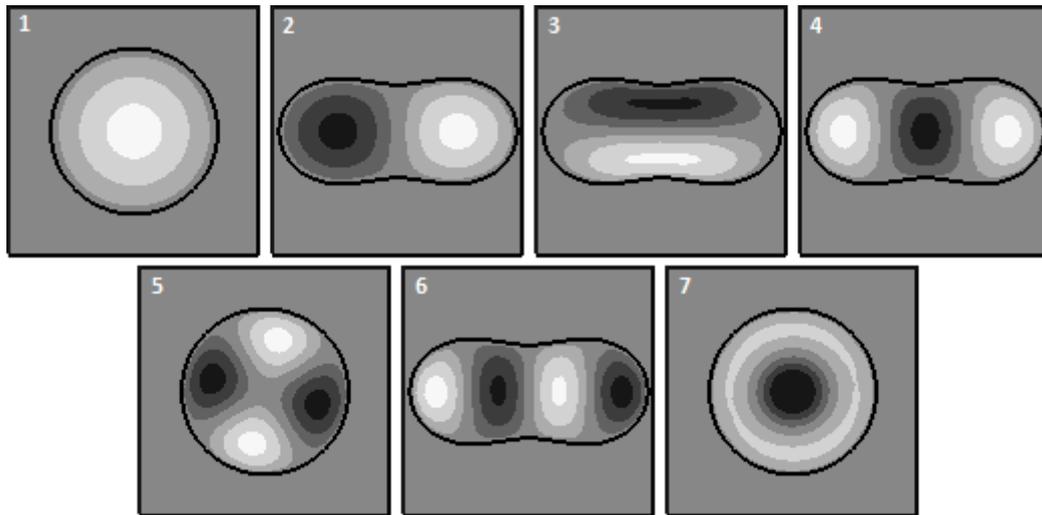


Рис. 1. Классификация связанных состояний в виде сечений через плоскость окна

В работе применена модель Хартри-Фока для случая взаимодействия двух частиц. Лапласиан системы тогда принимает вид $\hat{H} = \sum_k H_k + \frac{1}{2} \sum_{j \neq k} V_{j,k}$, где H_k – лапласианы отдельных частиц, $V_{j,k}$ – потенциал взаимодействия двух частиц, суммирование идет по количеству частиц. В качестве потенциала используется δ -потенциал. Для нахождения многочастичных решений был использован итеративный алгоритм.

Слева на рис. 2 приведены энергии различных типов состояний (см. рис. 1) как функции расстояния между фокусами овалов Кассини. Бледными линиями соответствуют энергиям для овальных окон. Справа на рис. 2 – энергии двухчастичного состояния с увеличением силы взаимодействия, обозначенные более темными линиями. Пунктиром обозначены нижние состояния из левой части рис. 2.

*Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ (проект № 20-31-90050)

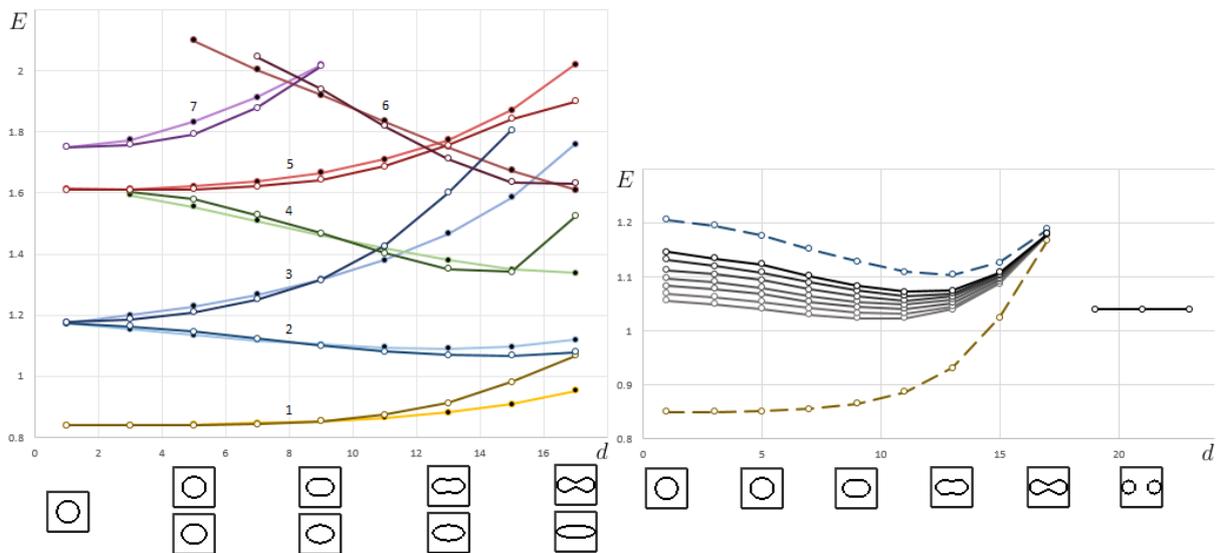


Рис. 2. Слева – энергии различных типов состояний. Справа – энергии двухчастичного состояния с увеличением силы взаимодействия.

На рис. 3 приведена зависимость энергий связанных состояний от силы поля (слева) и радиуса круглого окна (справа). Для этих расчетов предполагается, что электрическое поле симметрично относительно плоскости отверстия.

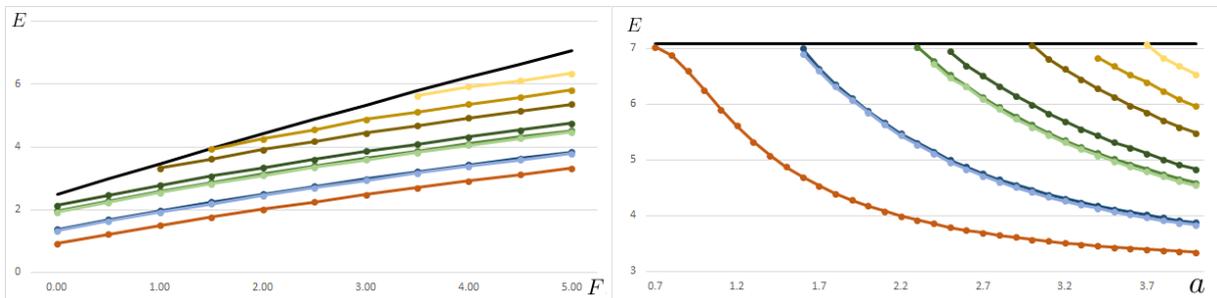


Рис. 3. Зависимость энергий связанных состояний от силы поля (слева) и радиуса круглого окна (справа)

Основным результатом исследования являются графики зависимости энергии связанных состояний от формы окна между слоями. В частности, мы рассматриваем окна двух типов: эллиптические и овалы Кассини. Площадь окна одинакова во всех случаях. Связанные состояния одной частицы мы классифицируем по количеству и типу зон знакопостоянства (рис. 1). Соответствующие указанной классификации энергии указаны на рис. 2. Также, мы рассматриваем двухчастичную систему и сравниваем уровни энергии с одночастичным случаем (рис. 2). Для случая симметричного внешнего поля зависимость энергий связанных состояний от интенсивности поля и радиуса круглого отверстия, приведены на рис. 3.

Таким образом, полученные результаты отвечают классической теореме Куранта, но различные в соответствии с нашей классификацией типы связанных состояний имеют совершенно различную динамику изменения энергии в зависимости от типа окна. Случаи двух частиц тесно связаны с параллельными случаями одной частицы определенного типа, что позволяет дать оценку основных характеристик. Также в работе рассмотрены возможности управления количеством и глубиной связанных состояний при вариации силы поля и площади отверстия.

Литература

1. Борисов Д. Дискретный спектр пары несимметричных волноводов, соединенных окном. // Сборник мат. 2006. Т. 197(4) С. 475–504.
2. Borisov D. Bound states in weakly deformed strips and layers / Borisov D., Exner P. and Gadylshin R. D. Krejcirik // Annales Henri Poincare. 2001. Т. 2(3). С. 553-572.
3. Popov I.Yu. Asymptotics of bound states and bands for laterally coupled waveguides and layers // J. Math. Phys. 2002. Т. 43(1). С. 215–234.
4. Borisov D. On the spectrum of two quantum layers coupled by a window // J. Phys. A: Math. Theor. 2007. Т. 40(19) С. 5045-5066.

MSC2020 81Q05

Classification of bound states for connected layers

A. S. Bagmutov, I. Yu. Popov
ITMO University

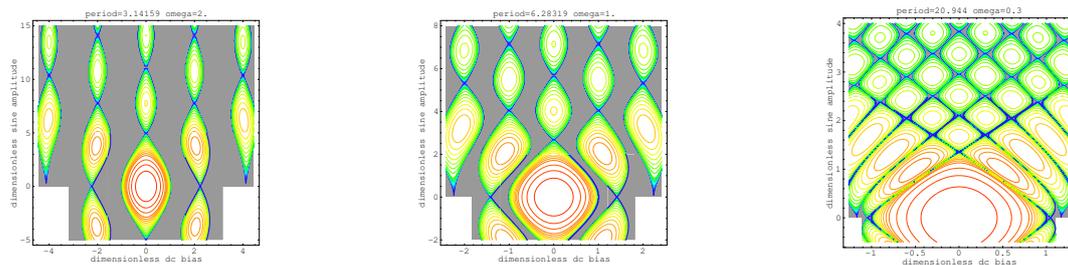
MSC2020 92E99

Dynamical systems on \mathbb{T}^2 modeling Josephson junction isomonodromic deformations and Painlevé 3 equations*

Yulia Bibilo^{1, 2}, Alexey Glutsyuk^{3, 4}

University of Toronto at Mississauga¹, Institute for Information Transmission Problems², CNRS³, HSE University⁴

The tunneling effect predicted by B. Josephson (Nobel Prize, 1973) concerns the Josephson junction: two superconductors separated by a narrow dielectric. It states existence of a supercurrent through it and equations governing it. The *overdamped Josephson junction* is modeled by a family of differential equations on 2-torus depending on 3 parameters: B (abscissa), A (ordinate), ω (frequency). We study its *rotation number* $\rho(B, A; \omega)$ as a function of (B, A) with fixed ω . The *phase-lock areas* are the level sets $L_r := \{\rho = r\}$ with non-empty interiors; they exist for $r \in \mathbb{Z}$ [1]. They are analogues of the famous Arnold tongues. Each L_r is an infinite chain of domains going vertically to infinity and separated by points called *constrictions* (except for those with $A = 0$). See the figures below for $\omega = 2, 1, 0.3$.



We show [2] that: 1) *all constrictions in L_r lie in the vertical line $\{B = \omega r\}$* ; 2) *each constriction is positive*: some its punctured neighborhood in the vertical line lies in $\text{Int}(L_r)$. These results confirm experiences of physicists (pictures from physical books of 1970-th) and two mathematical conjectures.

The proof uses an equivalent description of model by linear systems of differential equations on $\overline{\mathbb{C}}$ [1], their isomonodromic deformations described by Painlevé 3 equations and methods of theory of slow-fast systems.

References

1. Buchstaber V.M., Karpov O.V., Tertychnyi S.I. The rotation number quantization effect. Theoret and Math. Phys. 2010. Vol. 162, No. 2, pp. 211–221.
2. Bibilo Yu., Glutsyuk A. On families of constrictions in model of overdamped Josephson junction and Painlevé 3 equation. Preprint. 2021. URL: <https://arxiv.org/abs/2011.07839>

*Research of A.Glutsyuk is supported by RSF grant No 18-41-05003

УДК 519.642

Приближенные методы решения обратных задач геофизики

Бойков И. В., Рязанцев В. А.

Пензенский государственный университет

Доклад представляет собой обзор результатов, полученных авторами в области исследования и решения обратных и некорректных задач геофизики.

Вышеупомянутые результаты могут быть условно разделены на три основные направления.

1. Построение итерационных методов решения задачи одновременного восстановления параметров возмущающего тела. В рамках этого направления авторами построены и теоретически обоснованы аналитические и численные методы решения обратной задачи гравirazведки, состоящей в одновременном восстановлении характеристик гравитирующего тела на основании известных элементов аномального гравитационного поля на и над поверхностью Земли [1, 2]. Также следует отметить работы, посвящённые применению к решению обратных задач гравirazведки сплайн-коллокационных итерационных методов [3], а также непрерывного операторного метода решения нелинейных уравнений [4].
2. Применение краевой задачи Римана и сингулярных интегральных уравнений к обратным задачам теории потенциала. Вопросам сведения обратных задач геофизики к нелинейным сингулярным интегральным уравнениям и их последующего решения различными численными методами посвящено множество работ (обзор литературы приведён в [5]). Среди важных результатов следует отметить монографию [5], в которой предлагается использовать для решения соответствующего сингулярного интегрального уравнения модификацию метода Ньютона-Канторовича. Кроме того, идеи, лежащие в основе решения обратных задач гравirazведки при помощи сингулярных интегральных уравнений, были с успехом применены [5] к решению обратных задач электроразведки.
3. Численные методы продолжения геофизических полей. Разработаны численные методы решения важнейшей для теории потенциала задачи продолжения потенциальных полей на основе применения аппарата сингулярных интегральных уравнений и интегралов типа Коши [5]. Здесь необходимо в первую очередь отметить работы [6, 7], в которых для решения вышеупомянутой задачи построены оптимальные по порядку кубатурные формулы вычисления интегралов Стрэттона-Чу. Кроме того, для решения интегральных уравнений, построенных на основе интегралов Стрэттона-Чу, построен сплайн-коллокационный метод (описание этих результатов см. в [5]). Наконец, необходимо упомянуть о работах авторов [8, 9], посвящённых применению разностных схем к решению задачи продолжения потенциальных полей: в указанных работах построены разностные схемы с переменными шагами по всем направлениям с узлами, выбираемыми в результате анализа оптимальных методов аппроксимации потенциальных полей [5].

В настоящее время авторами активно ведутся работы по дальнейшему развитию всех упомянутых выше направлений и распространению полученных результатов на другие классы обратных и некорректных задач математической физики.

Литература

1. Бойков И.В., Рязанцев В.А. К вопросу об одновременном восстановлении плотности и уравнения поверхности в обратной задаче гравиметрии для контактной поверхности // Сибирский журнал вычислительной математики. 2020. Т. 23. № 3. С. 289-308.
2. Бойков И.В., Рязанцев В.А. Приближенные методы одновременного восстановления формы тела и его плотности в обратной задаче теории потенциала // Журнал Средневолжского математического общества. 2014. Т. 16. № 3. С. 21-31.
3. Бойков И.В., Бойкова А.И. Об одном приближенном методе решения обратных задач гравиметрии и магнитометрии // Известия РАН. Физика Земли. 2009. № 3. С. 73-82.
4. Boikov I.V., Boikova A.I., Baulina O.A. Continuous method for solving of gravity prospecting problems // Practical and theoretical aspects of geological interpretation of gravitational, magnetic and electric fields. Proceedings of the 45th Uspensky international geophysical seminar (Kazan, 2019).Springer. 2019. P. 55-69.
5. Бойков И.В., Бойкова А.И. Приближенные методы решения прямых и обратных задач гравиразведки. Пенза: Изд-во Пензенского государственного университета. 2013. 510 с.
6. Бойков И.В., Крючко В.И. Об одном приближенном методе продолжения потенциальных полей // Вопросы теории и практики геологической интерпретации гравитационных, магнитных и электрических полей (материалы 33 сессии Международного семинара им. Д.Г. Успенского, г. Екатеринбург, 2006 г.). С. 54-59.
7. Бойков И.В., Бойкова А.И., Крючко В.И., Филиппов А.В. Дискретные модели продолжения потенциальных полей // Геофизический журнал. 2007. Т. 29. Вып. 4. С. 67-82.
8. Бойков И.В., Рязанцев В.А. Об одном разностном методе продолжения потенциальных полей // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. 2014. № 2(30). С. 20-33.
9. Бойков И.В., Рязанцев В.А. К вопросу об оптимальной аппроксимации геофизических полей // Сибирский журнал вычислительной математики. 2021. Т. 24. № 1. С. 17-34.

MSC2020 45Q05

Approximate methods for solving inverse geophysical problems

I. V. Boykov, V. A. Ryazantsev
Penza State University

УДК 51-73

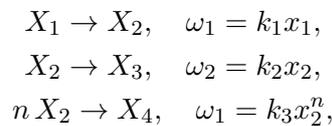
Исследование устойчивости кинетической модели химической реакции

Босоногова М. В., Пескова Е. Е., Язовцева О. С.

Национальный исследовательский Мордовский государственный университет

Отсутствие универсальных методов исследования устойчивости нелинейных моделей обуславливает актуальность освещаемой в докладе темы.

Рассмотрим сложную химическую реакцию вида:



где w_i , $i = \overline{1,3}$ – скорость i -ой стадии реакции; k_i , $i = \overline{1,3}$ – константы скоростей стадий; x_j , $j = \overline{1,4}$, – концентрация вещества X_j .

Подобные цепи, включающие в себя последовательные реакции с последующей полимеризацией, встречаются, например, при переработке углеводородного сырья [1].

В предположении изотермичности процессов и гомогенного (квазигомогенного) характера реакции кинетическая реакция представляет собой нелинейную систему обыкновенных дифференциальных уравнений:

$$\begin{cases} \dot{x}_1 = -k_1 x_1, \\ \dot{x}_2 = k_1 x_1 - k_2 x_2 - k_3 x_2^n, \\ \dot{x}_3 = k_2 x_2, \\ \dot{x}_4 = k_3 x_2^n. \end{cases} \quad (1)$$

Система имеет бесконечно много положений равновесия вида

$$(0, 0, x_3^*, x_4^*), \quad x_3^*, x_4^* \in \mathbb{R}^+. \quad (2)$$

Для линеаризации системы (1) в точках положениях равновесия вида (2) построена матрица Якоби

$$\begin{pmatrix} -k_1 & 0 & 0 & 0 \\ k_1 & -k_2 & 0 & 0 \\ 0 & k_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (3)$$

В окрестности любого положения равновесия вида (2) матрица (3) имеет несколько нулевых собственных значений – критический случай по Ляпунову. Одним из методов исследования устойчивости в критическом случае является метод асимптотической эквивалентности [1].

Фундаментальная матрица для линейного приближения системы (1) имеет вид:

$$\begin{pmatrix} \frac{k_1 - k_2}{k_2} e^{-k_1 t} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{k_1}{k_2} e^{-k_1 t} & -e^{-k_2 t} & 0 & 0 \\ e^{-k_1 t} & e^{-k_2 t} & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (4)$$

Из работы [2] (теоремы 3.1 и 3.2) получены достаточные условия для следующих асимптотических свойств положений равновесия вида (2) системы (1). Оно асимптотически устойчиво по переменным x_1 и x_2 и устойчиво по переменным x_3 и x_4 при выполнении условий $k_2 < k_1 < n k_2$ или $k_1 < k_2 < n k_1$.

Для иллюстрации полученного результата был проведен численный эксперимент. На рис. 1 и 2 представлены графики решений системы (1) для различных параметров, соответствующих полученным достаточным условиям. Результаты численного эксперимента не противоречат теоретическим результатам.

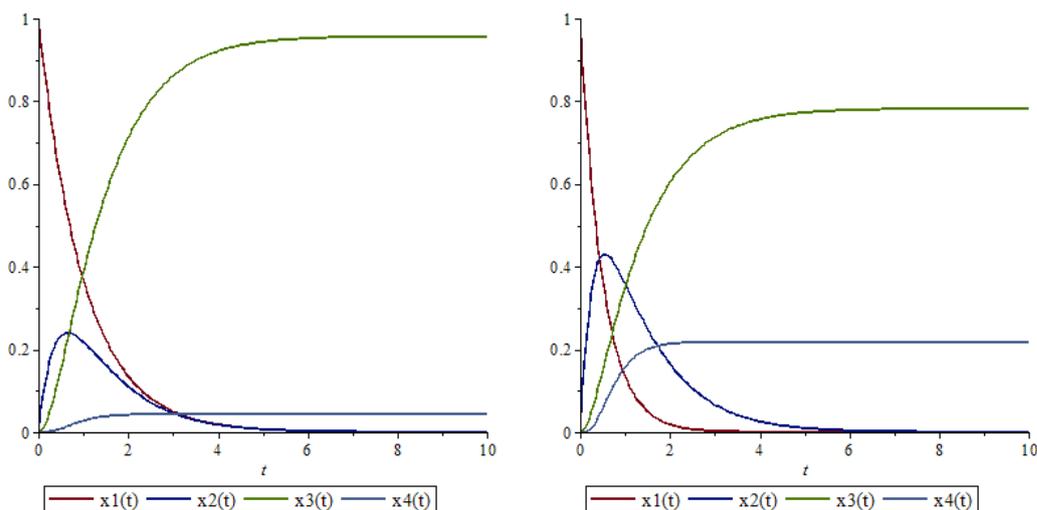


Рис. 1. Графики решений системы (1) при $k_1 = 1, k_2 = 2, k_3 = 3, n = 3$

Рис. 2. Графики решений системы (1) при $k_1 = 2, k_2 = 1, k_3 = 3, n = 3$

С точки зрения химических процессов полученный результат предполагает наложение на константы скоростей некоторых условий, соблюдение которых может быть достигнуто, например, изменением температуры проведения реакции.

Литература

1. Мухина Т. Н., Барабанов Н. Л., Бабаш С. Е. и др. Пиролиз углеводородного сырья. М.: Химия, 1987. 240 с.
2. Шаманаев П. А., Язовцева О. С. Достаточные условия локальной покомпонентной асимптотической эквивалентности нелинейных систем обыкновенных дифференциальных уравнений и ее приложение к устойчивости по части переменных // Журнал Средневолжского математического общества. 2017. Т. 19, № 1. С. 102-115.

MSC2020 93A30, 80A30

Investigation of the stability of the chemical reaction's kinetic model

M. V. Bosonogova, E. E. Peskova, O. S. Yazovtseva

National Research Mordovia State University

УДК 531.36

Вектор-функции Ляпунова в задаче об устойчивости неавтономной системы с цилиндрическим фазовым пространством

Буранов Ж. И.¹, Хусанов Д. Х.²

Академический лицей ТашГТУ им. И. Каримова¹,
Джизакский политехнический институт²

Исследование свойств устойчивости системы дифференциальных уравнений с цилиндрическим фазовым пространством имеет ряд важных особенностей [1]. В данной работе представлено развитие метода векторных функций Ляпунова с принципом сравнения в исследовании свойств устойчивости такой системы.

Рассмотрим систему дифференциальных уравнений

$$\dot{x} = X(t, x), \quad X(t, 0) \equiv 0, \quad (1)$$

где $x \in R^n$, $X(t, x) = (X_1(t, x), X_2(t, x), \dots, X_n(t, x))^T$ (индекс T означает транспонирование), вещественные функции $X_i(t, x)$, $i = 1, 2, \dots, n$ определены и непрерывны в области $R \times R^n$ и удовлетворяют в этой области следующему условию: переменную x можно разделить $x^T = (y^T, z^T)$, $y \in R^m$, $z \in R^s$, $m + s = n$, так что функция $X(t, x)$ является 2π -периодической по переменной z , т. е. $X(t, y, z + 2\pi 1_j) = X(t, y, z)$, $(z + 2\pi 1_j) = (z_1, z_2, \dots, z_{j-1}, z_j + 2\pi, z_{j+1}, \dots, z_s)$, $j = 1, 2, \dots, s$.

Таким образом, решения системы (1) можно рассматривать в цилиндрическом фазовом пространстве $R \times R^m \times P^s$, $P^s = \{z \in R^s : -\pi \leq z_j \leq \pi, j = 1, 2, \dots, s\}$.

Будем полагать также, что функция X удовлетворяет условию Липшица по x равномерно относительно $t \in R$, так что

$$\|X(t, y^{(2)}, z^{(2)}) - X(t, y^{(1)}, z^{(1)})\| \leq L_1(H) \|y^{(2)} - y^{(1)}\| + L_2(H) \|z^{(2)} - z^{(1)}\|$$

для всех $(t, y^{(1)}, z^{(1)}), (t, y^{(2)}, z^{(2)}) \in R \times \{y \in R^m : \|y\| \leq H = \text{const} > 0\} \times P^s$, где $\|y\|$ есть некоторая норма вектора $y \in R^m$, $\|z\|$ есть норма вектора $z \in R^s$, $\|x\| = \|y\| + \|z\|$.

Заметим, что при этих условиях имеют место свойства существования, единственности решений системы (1), а также их нелокальной продолжимости и непрерывной зависимости от начальных данных и времени. Таким образом, можно определить зависимость $x = x(t, t_0, x_0)$ ($0 < \alpha < t - t_0 < \beta$), $(t_0, x_0) \in R \times R^m \times P^s$.

При этом предположении также семейство сдвигов $\{X_\tau(t, x) = X(t + \tau, x), \tau \in R^+\}$ является предкомпактным в некотором компактном метрическом пространстве с замыканием [2]

$$F_X = \{X^*(t, x)\}, \quad X^*(t, x) = \frac{d}{dt} \lim_{j \rightarrow \infty} \int_0^t X_j(\tau, x) d\tau, \quad X_j(\tau, x) = X_j(t_j + \tau, x) \quad (2)$$

относительно последовательности $t_j \rightarrow +\infty$ для любых $x = (y, z) \in R^m \times P^s$ и $t \in R^+$.

Соответственно можно ввести семейство предельных систем согласно следующему определению.

Определение 1. Система уравнений

$$\dot{x} = X^*(t, x), \quad X^* \in F_X \quad (3)$$

называется предельной к исходной системе (1).

Введем также следующее определение положительного предельного множества $\omega^+(x(t, t_0, x_0))$ решения $x = x(t, t_0, x_0)$ системы (1), полагая, что $Z^{(1)}$ есть множество целых чисел.

Определение 2. Точка $p = (p^{(1)}, p^{(2)}) \in R^m \times P^s$ называется положительной предельной точкой решения $x = x(t, t_0, x_0)$ системы (1), если существуют последовательности $t_k \rightarrow \infty$ и $L^{(k)} = (l_1^{(k)}, l_2^{(k)}, \dots, l_s^{(k)})$, $l_j^{(k)} \in Z^{(1)}$, $j = 1, 2, \dots, s$, такие, что $y(t_k, t_0, x_0) \rightarrow p^{(1)}$, $z(t_k, t_0, x_0) - 2\pi L^{(k)} \rightarrow p^{(2)}$ при $k \rightarrow \infty$. Множество $\omega^+(x(t, t_0, x_0))$ всех таких точек есть положительное предельное множество.

Определение 3. Множество $M \subset R^m \times P^s$ называется квазиинвариантным по отношению к системе (1), если $\forall p = (p^{(1)}, p^{(2)}) \in M$ найдется предельная система (3), такая, что ее решение $x = x(t, 0, p)$ таково, что $x(t, 0, p) \in M \pmod{2\pi} \forall t \in (\alpha, \beta)$ ($\alpha < 0 < \beta$), где (α, β) – интервал определения этого решения.

Доказывается следующее утверждение динамического типа.

Теорема 1. Пусть $x = x(t, t_0, x_0)$ есть некоторое решение системы (1), ограниченное компактом $K \subset R^n$ при всех $t \geq t_0$. Тогда положительное предельное множество $\omega^+(t_0, x_0)$ этого решения связно, компактно и квазиинвариантно.

Введем класс \mathcal{K}_1 векторных функций $V = (V^1, V^2, \dots, V^k)^T$, $V : R \times R^n \rightarrow R^k$, периодических по z_i , $i = 1, 2, \dots, s$ с периодом 2π ,

$$V(t, y, z + 2\pi 1_j) = V(t, y, z), \quad j = 1, 2, \dots, s,$$

являющихся ограниченными и равномерно непрерывными на множестве $R \times K_1 \times P^s$, где $K_1 = \{y \in R^n : \|y\| \leq H_1 > 0\}$.

Пусть также \mathcal{K}_2 – класс векторных функций $U : R \times R^k \rightarrow R^k$, ограниченных и равномерно непрерывных на множестве $K_2 = \{u \in R^k : \|u\| \leq H_2 > 0\}$, и \mathcal{K}_3 – класс векторных функций $W : R \times R^m \times P^s \times R^k \rightarrow R^k$, ограниченных и равномерно непрерывных на множестве $R \times K_1 \times P^s \times K_2$.

Рассмотрим функциональное пространства непрерывных векторных функций $F_1 = \{V : R \times R^n \rightarrow R^k\}$, $F_2 = \{U : R \times R^k \rightarrow R^k\}$, $F_3 = \{W : R \times R^m \times P^s \times R^k \rightarrow R^k\}$ с открыто-компактной топологией. Семейство сдвигов $V_\tau(t, x) = V(\tau + t, x)$, $\tau \in R$, $\{U_\tau(t, u) = U(\tau + t, u)\}$, $\{W_\tau(t, x, u) = W(\tau + t, x, u)\}$ функций $V \in \mathcal{K}_1$, $U \in \mathcal{K}_2$, $W \in \mathcal{K}_3$ будут предкомпактны соответственно в F_1 , F_2 , F_3 .

Таким образом, можно определить семейства $\{V^*\}$, $\{U^*\}$, $\{W^*\}$ соответствующих предельных функций, а также предельные совокупности $\{X^*, V^*, U^*, W^*\}$.

Пусть для системы (1) найдется непрерывно дифференцируемая функция $V \in \mathcal{K}_1$, производная которой в силу этой системы представима в виде [3, 4]

$$\begin{aligned} \dot{V}(t, x) &= U(t, V(t, x)) + W(t, x, V(t, x)), \\ U(t, 0) &= 0, \quad W(t, 0, V(t, 0)) = 0, \end{aligned} \quad (4)$$

где функция $U = U(t, u)$ принадлежит классу \mathcal{K}_2 , $U \in \mathcal{K}_2$, и является квазимоноотонной и непрерывно дифференцируемой по $u \in R^k$, $\partial U / \partial u \in \mathcal{K}_2$, функция $W = W(t, x, u)$

принадлежит классу \mathcal{K}_3 , $W \in \mathcal{K}_3$, и имеет место неравенство $W(t, x, u) \leq 0$ для любых $(t, x, u) \in R \times R^n \times R^k$.

Из равенства (4) следует, что функция $V(t, x)$ является вектор-функцией сравнения, а система

$$\dot{u} = U(t, u) \quad (5)$$

является системой сравнения.

Так как $U \in K_2$, то система (5) является предкомпактной и для неё существует семейство предельных систем сравнения

$$\dot{u} = U^*(t, u), \quad U^* \in F_2. \quad (6)$$

Рассматривая условия относительно правой части $U = U(t, u)$ системы (5), получим, что решения $u = u(t, t_0, u_0)$ этой системы непрерывно дифференцируемы по $(t_0, u_0) \in R^+ \times R^k$. Из свойства неубывания функции $u(t, t_0, u_0)$ по переменной u_0 следует, что матрица

$$\Phi(t, t_0, u_0) = \frac{\partial u(t, t_0, u_0)}{\partial u_0}$$

является неотрицательной, нормированной, $\Phi(t_0, t_0, u_0) = I$ ($I \in R^{n \times n}$ — единичная матрица) фундаментальной матрицей для линейной системы в вариациях

$$\dot{y} = H(t, t_0, u_0)y, \quad H = \left. \frac{\partial U(t, u)}{\partial u} \right|_{u=u(t, t_0, u_0)}.$$

Предположим, что для любого компакта $K_2 = \{u \in R^l : \|u\| \leq H_2\}$ существуют числа $M(K_2)$ и $\alpha(K_2)$, такие, что матрица Φ для любых $(t, t_0, u_0) \in R^+ \times R^+ \times K_2$ удовлетворяет условиям

$$\|\Phi(t, t_0, u_0)\| \leq M(K_2), \quad \det \Phi(t, t_0, u_0) \geq \alpha(K_2). \quad (7)$$

Имеет место следующая теорема о локализации положительного предельного множества $\omega^+(t_0, x_0)$ решения системы (1).

Теорема 2. Допустим, что $x = x(t, t_0, x_0)$ есть некоторое решение системы (1) и найдется векторная функция Ляпунова $V \in \mathcal{K}_\infty$, такая, что

- 1) $\|V(t, y, z)\| \rightarrow \infty$ равномерно по $(t, z) \in R^+ \times P^s$ при $\|y\| \rightarrow \infty$;
- 2) $V(t, y, z)$ ограничена при $\|y\| \leq H = \text{const} > 0$, $\|V(t, y, z)\| \leq m(H) \forall (t, y, z) \in R^+ \times \{y : \|y\| \leq H\} \times P^s$;
- 3) производная \dot{V} удовлетворяет равенству (4);
- 4) решения системы сравнения (5) удовлетворяют условию (7);
- 5) решение $u(t, t_0, V_0)$ системы сравнения (5), где $V_0 = V(t_0, x_0)$ ограничено при всех $t \geq t_0$.

Тогда выполняется соотношение $\omega^+(x(t, t_0, x_0)) \subset M$, где M — максимальное инвариантное подмножество множества $\{W^*(t, x, u^*(t)) = 0\}$, $u^*(t)$ есть решение соответствующей предельной системы сравнения (6) с начальным условием $u^*(0) = V^*(0, p)$ для выбранной точки $p \in \omega^+(x(t, t_0, x_0))$.

В соответствие векторной функции $V = (V^1, V^2, \dots, V^r)^T$ введем скалярную функцию

$$\bar{V}(t, x) = \sum_{j=1}^r V^j(t, x).$$

Введем класс \mathcal{K}_4 непрерывных функций типа Хана $a_i : R^+ \rightarrow R^+$, $a_i(0) = 0$, a_i строго монотонно возрастает, $i = 1, 2$. Имеет место также следующая теорема об устойчивости.

Теорема 3. *Предположим, что для системы (1) можно найти векторную функцию $V = V(t, x)$, такую, что:*

- 1) *выполнены условия 1 – 4 Теоремы 2;*
- 2) $a_1(\|x\|) \leq \bar{V}(t, x) \leq a_2(\|x\|)$;
- 3) *решение $u = 0$ системы сравнения (5) равномерно устойчиво;*
- 4) *для каждой предельной совокупности $\{X^*, V^*, W^*, U^*\}$ множество $\{W^*(t, x, u^*(t)) = 0\} \setminus \{x \in R^n : y = 0, z = \pi L^{(k)}\}$ не содержит решений системы (3), где $u^*(t) \neq 0$ есть любое ненулевое решение системы (6).*

Тогда:

- 1) *решение $x = 0$ и соответственно множество положений равновесия $\{x \in R^n : y = 0, z = 2\pi L^{(k)}\}$ системы (1) равномерно асимптотически устойчивы;*
- 2) *множество положений равновесия $\{x \in R^n : y = 0, z = \pi L^{(k)}\}$ системы (1) является глобально притягивающим.*

Доказанные теоремы развивают соответствующие результаты работ [1, 3–8]. Теоремы применены в задаче о стабилизации программного положения двухзвенного манипулятора.

Литература

1. Барбашин Е. А., Табуева В. А. Динамические системы с цилиндрическим фазовым пространством. М.: Физматгиз, 1969. 300 с.
2. Artstein Z. Topological dynamics of ordinary differential equations // J. Differ. Equat. 1977. Vol. 23. P. 216-223.
3. Перегудова О. А. Метод сравнения в задачах устойчивости и управления движениями механических систем. Ульяновск: УлГУ, 2009. 253 с.
4. Андреев А. С., Перегудова О. А. К методу сравнения в задачах об асимптотической устойчивости // ПММ. 2006. Т. 70. Вып. 6. С. 965-976.
5. Каюмов О. Р. Асимптотическая устойчивость в большом в системах с цилиндрическим фазовым пространством // Изв. вузов. Матем. 1987. № 10. С. 61–63.
6. Леонов Г. А., Селеджи С. М. Системы фазовой синхронизации в аналоговой и цифровой схемотехнике. СПб.: Невский диалект, 2002. 112 с.
7. Andreev A. S., Peregudova O. A. On global trajectory tracking control of robot manipulators in cylindrical phase space // International Journal of Control. 2020. Vol. 93, No. 2. pp. 3003–3015.
8. Матросов В. М. Метод векторных функций Ляпунова: анализ динамических свойств нелинейных систем. М: Физматлит, 2001. 380 с.

MSC2020 34D20

Lyapunov vector-functions in the stability problem of a non-autonomous system with a cylindrical phase space

J. I. Buranov¹, D. Kh. Khusanov²

Academic lyceum of Taskent State Technical University named after I.Karimov¹,
Jizzakh Polytechnic Institute²

УДК 519.6

Численное моделирование распространения ударных волн на подвижных неструктурированных сетках по методике ЛОГОС-волна

Веселова Е. А., Дерюгин Ю. Н., Ктиторов В. М.
ФГУП "РФЯЦ - ВНИИЭФ"

В ряде приложений возникает необходимость моделировать ударную волну на больших временах и расстояниях от места взрыва, при влиянии различных факторов на форму и скорость ударной волны [1-5]. В общем случае, расчет распространения ударных волн возможен по любому многомерному газодинамическому коду. Однако в большинстве созданных кодов расчет ударных волн проводится «сквозным» методом, который требует либо построение сеточной модели для всей области распространения волны, либо разработке специализированных алгоритмов адаптации сетки к области, где находится волна. Все это приводит к большим затратам вычислительных ресурсов. В работах [6,7] был развит подход, основанный на выделении ударной волны в сочетании с адаптивной сеткой, подстраиваемой под ее движение. На основе такого подхода был создан ряд двумерных и трехмерных математических методик и программ на блочных структурированных сетках.

В данной работе представлена параллельная методика расчета двумерных задач газовой динамики на геометрически адаптивных неструктурированных сетках [8]. Геометрическая адаптация связана с выделением в решении основных особенностей, таких как ударные волны и контактные разрывы. Скорость движения разрывов и параметры на разрывах определяются из решения задачи Римана о распаде разрыва. Смещение внутренних узлов сетки определяется методом интерполяции по смещению граничных узлов. Разностные уравнения получены дискретизацией исходных уравнений в интегральной форме квадратурными формулами прямоугольников. При решении уравнений Эйлера численные конвективные потоки определяются на основе решения задачи о распаде разрыва. Для повышения точности моделирования предраспадные параметры потока определяются с использованием линейной либо квадратичной реконструкции решения. В задачах со сферической симметрией с целью уменьшения немонотонности в численном решении применяется алгоритм доворота вектора скорости у предраспадных параметров потока.

Возможности методики иллюстрируются на двух задачах расчета ударных волн. В первой задаче численно исследуются развития двумерных возмущений в сильном взрыве. Такая задача рассматривалась в работах [3,4], где для идеального газа было построено автомодельное решение и было показано, что при значениях показателя адиабаты газа, близких к единице, на фронте волны реализуется неустойчивость типа Релея-Тейлора [3]. В работе [4] был найден критерий устойчивости и определены инкременты наиболее быстро растущих гармоник. По созданной методике были проведены расчеты эволюции двумерных возмущений для различных гармоник и показателя адиабаты. Результаты расчетов сравниваются с автомодельным решением из работы [4]. Отмечается хорошее согласование результатов численных расчетов с аналитическим решением.

Во второй задаче численно исследуется искривление фронта ударной волны, распространяющейся по среде, включающей канал из другого вещества. Для такой задачи в работе [5] на основе автомодельного решения было построена зависимость коэффициента возмущения фронта волны в канале. Численно были проведены расчеты модельной задачи об ис-

кривлении фронта волны при вариации плотности вещества в канале. Результаты расчетов сравниваются с аналитическим решением из работы [5]. Здесь также отмечается хорошее согласование результатов численных расчетов с аналитическим решением.

Литература

1. Бруд Г. Сб. Механика № 3. Расчеты взрывов на ЭВМ. Подземные взрывы. - М.: Мир, 1975-164 с.
2. Зайдель Р.М. Влияние начальной разноплотности на движение ударной волны. – Изв. РАН. МЖГ. 1968. № 4. С. 152-162.
3. Vishiac E.T. The dynamic and gravitational instabilities of spherical shocks. Astrophysical Journal, Part 1. 1983. Vol. 274, No. 1. pp. 152-167.
4. Ктиторов В.М., ВАНТ, Сер. ТиПФ № 2(2), 28, 1984.
5. Ктиторов В.М. Движение ударной волны в присутствии слабо выделенного канала // ВАНТ, Сер. ТиПФ. - 1990. - № 2(2), С. 10-11.
6. Годунов С.К., Забродин А.В., Прокопов Г.П. Разностная схема для двумерных нестационарных задач газовой динамики и расчет обтекания с отошедшей ударной волной. ЖВМиМФ 1, 36 1020-1050.
7. Годунов С.К., Забродин А.В., Иванов М.Я., Крайко А.Н., Прокопов Г.П. Численное решение многомерных задач газовой динамики. - М.: Наука, 1976. - 400 с.
8. Веселова Е.А., Дерюгин Ю.Н., Зеленский Д.К. Методика ЛОГОС-ВОЛНА расчета двумерных задач газовой динамики с учетом теплопроводности на подвижных неструктурированных сетках // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2021. В печати

MSC2020 76D05, 76M12

Numerical simulation of the propagation of shock waves on moving unstructured grids using the LOGOS-wave technique

E. A. Veselova , Yu. N. Deryugin, V. M. Ktitorov
FSUE RFNC - VNIIEF

УДК 515.162.2

О топологии многообразий, допускающих каскады с гиперболическими неблуждающим множеством *

Гринес В.З.

Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»

Мы изучаем топологию замкнутых гладких многообразия M^n , допускающих A -диффеоморфизм $f : M^n \rightarrow M^n$, то есть диффеоморфизм, удовлетворяющий аксиоме A С. Смейла:

- неблуждающее множество $NW(f)$ диффеоморфизма f является гиперболическим;
- множество периодических точек f плотно в $NW(f)$.

Согласно С. Смейлу, $NW(f)$ представляется в виде конечного объединения непересекающихся инвариантных замкнутых множеств, каждое из которых содержит транзитивную орбиту. Эти множества называются базисными.

Если размерность некоторого базисного множества Λ диффеоморфизма f больше единицы и совпадает с размерностью несущего многообразия M^n ($n > 1$), то Λ единственно и совпадает со всем многообразием M^n . В этом случае диффеоморфизм f является диффеоморфизмом Аносова.

Согласно Дж. Фрэнксу и Ш. Ньюхаусу, если размерность каждого слоя неустойчивого или устойчивого слоения диффеоморфизма Аносова, заданного на многообразии M^n , равна единице, то M^n является n -тором.

Если размерность базисного множества Λ A -диффеоморфизма f равна $n - 1$, то, согласно Р. Плыкину, Λ является либо аттрактором, либо репеллером. Более того, если Λ является растягивающимся аттрактором или сжимающимся репеллером, то он имеет локальную структуру произведения Канторова множества и $(n-1)$ -диска. Автор доклада и Е. В. Жужома доказали, что если неблуждающее множество структурно устойчивого диффеоморфизма f содержит ориентируемый растягивающийся аттрактор (сжимающийся репеллер) коразмерности один, то несущее многообразие M^n является n -тором. Недавно они (вместе с В. Медведевым) доказали, что если неблуждающее множество A -диффеоморфизма f состоит из $k \geq 2$ растягивающихся аттракторов и сжимающихся репеллеров коразмерности один, то несущее многообразие M^n гомеоморфно связной сумме k копий тора \mathbb{T}^n и $m \geq 0$ копий $\mathbb{S}^{n-1} \times \mathbb{S}^1$, где m зависит от свойств аттракторов и репеллеров.

Для $n = 3$, в [1] описана топологическая структура замкнутых ориентируемых 3-многообразий, допускающих структурно устойчивые диффеоморфизмы, неблуждающие множества которых состоят из базисных множеств размерности два.

Доклад будет посвящен обсуждению вышеописанных результатов и их применению к топологической классификации A -диффеоморфизмов на многообразиях. Для знакомства с основными сведениями и результатами по тематике доклада полезно обратиться к статьям и обзорам [1–3].

*Работа над докладом поддержана Российским научным фондом (проект 21-11-00010) а также лабораторией динамических систем и приложений НИУ ВШЭ, грант Министерства науки и высшего образования РФ (соглашение № 075-15-2019-1931).

References

1. Grines V., Pochinka O., Levchenko Yu., Medvedev V. The topological classification of structural stable 3-diffeomorphisms with two-dimensional basic sets // *Nonlinearity*. 2015. Vol. 28. P. 4081-4102.
2. Grines V., Pochinka O., Zhuzhoma E. V. Rough diffeomorphisms with basic sets of codimension one. *Journal of Mathematical Sciences*. 2017. Vol. 225. No. 2. P. 195-219.
3. Grines V., Gurevich E., Pochinka O., Zhuzhoma E. Classification of Morse-Smale systems and topological structure of the underlying manifolds. *Russian Math. Surveys*, 74(2019), No. 1, pp. 37-110.

MSC2020 37E30

On the topology of manifolds admitting cascades with hyperbolic non-wandering sets

V. Z. Grines

National Research University «Higher School of Economics»

УДК 515.162.2

О топологической структуре несущих поверхностей для A -диффеоморфизмов с одномерными аттракторами и репеллерами*

Гринес В. З., Минц Д. И.

Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»

В работе [1] введён класс $\mathbb{G}(M^2)$ A -диффеоморфизмов замкнутых ориентируемых поверхностей, неблуждающее множество которых состоит из одномерных базисных множеств, и получена их топологическая классификация. Примеры диффеоморфизмов из класса $\mathbb{G}(M^2)$ могут быть построены на любой замкнутой ориентируемой поверхности рода $g \geq 2$. Основной целью настоящего доклада является установление топологической структуры несущих поверхностей для диффеоморфизмов из класса $\mathbb{G}(M^2)$, а также изучение свойств данных диффеоморфизмов.

Пусть M^2 – гладкая замкнутая ориентируемая поверхность, $f : M^2 \rightarrow M^2$ – диффеоморфизм, удовлетворяющий аксиоме A , $NW(f)$ – неблуждающее множество f .

Из [2] следует, что произвольное одномерное базисное множество диффеоморфизма $f : M^2 \rightarrow M^2$ является аттрактором или репеллером и имеет локальную структуру прямого произведения интервала и канторова множества.

Периодическая точка p , принадлежащая одномерному аттрактору (репеллеру) Λ диффеоморфизма $f : M^2 \rightarrow M^2$, называется s -граничной (u -граничной) периодической точкой, если одна из компонент связности множества $W^s(p) \setminus p$ ($W^u(p) \setminus p$) не пересекается с Λ и обе компоненты связности множества $W^u(p) \setminus p$ ($W^s(p) \setminus p$) пересекаются с Λ . Для одномерного аттрактора (репеллера) множество s -граничных (u -граничных) периодических точек не пусто и конечно.

Известно, что для одномерного аттрактора (репеллера) Λ достижимая изнутри граница множества $M^2 \setminus \Lambda$ распадается единственным образом на конечное число связок. Связкой b аттрактора (репеллера) Λ называется объединение максимального числа h_b неустойчивых (устойчивых) многообразий s -граничных (u -граничных) периодических точек p_1, \dots, p_{h_b} множества Λ , достижимых из некоторой (общей для всех) точки $x \in (M^2 \setminus \Lambda)$. Число h_b называется степенью связки.

Любое базисное множество Λ диффеоморфизма f единственным образом представляется в виде конечного объединения

$$\Lambda = \Lambda_1 \cup \dots \cup \Lambda_q, \quad q \geq 1,$$

компактных подмножеств, называемых C -плотными компонентами множества Λ , таких, что $f^q(\Lambda_j) = \Lambda_j$, $f(\Lambda_j) = \Lambda_{j+1}$, $j \in \{1, \dots, q\}$ ($\Lambda_{q+1} = \Lambda_1$). Для каждой точки x , принадлежащей C -плотной компоненте Λ_j , множество $W_x^s \cap \Lambda_j$ ($W_x^u \cap \Lambda_j$) плотно в Λ_j .

Для C -плотной компоненты Λ_i аттрактора (репеллера) Λ обозначим через m_{Λ_i} число связок, принадлежащих Λ_i , и через r_{Λ_i} сумму степеней этих связок. Для произвольной C -плотной компоненты Λ_i одномерного аттрактора (репеллера) Λ диффеоморфизма $f : M^2 \rightarrow M^2$ существует подмногообразие N_{Λ_i} (канонический носитель) со следующими свойствами:

*Результаты, полученные в докладе, выполнены при поддержке гранта РНФ (проект 21-11-00010), кроме доказательства теоремы 2, выполненного при поддержке Лаборатории динамических систем и приложений НИУ ВШЭ, грант Министерства науки и высшего образования РФ соглашение № 075-15-2019-1931

1. $N_{\Lambda_i} \cap NW(f) = \Lambda_i$;
2. N_{Λ_i} является компактной ориентируемой поверхностью рода $q_{\Lambda_i} = 1 + \frac{r_{\Lambda_i}}{4} - \frac{m_{\Lambda_i}}{2}$ с m_{Λ_i} компонентами края и отрицательной эйлеровой характеристикой.

Пусть $f : M^2 \rightarrow M^2$ – диффеоморфизм из класса $\mathbb{G}(M^2)$. Обозначим через k_f число всех C -плотных компонент всех базисных множеств диффеоморфизма f , через κ_f число всех связок, принадлежащих данным C -плотным компонентам, через g_i ($i \in \{1, \dots, k_f\}$) род канонического носителя i -ой C -плотной компоненты. Для числа $g \geq 0$ обозначим через M_g^2 замкнутую ориентируемую поверхность рода g . Основными результатами доклада являются следующие теоремы.

Теорема 1. Пусть $f \in \mathbb{G}(M^2)$. Тогда многообразие M^2 гомеоморфно связной сумме

$$M_{g_1}^2 \# \dots \# M_{g_{k_f}}^2 \# \underbrace{\mathbb{T}^2 \# \dots \# \mathbb{T}^2}_{m_f},$$

где $m_f = \frac{\kappa_f}{2} - k_f + 1$.

Теорема 2. Пусть $f \in \mathbb{G}(M^2)$. Тогда f является Ω -устойчивым, но не является структурно устойчивым.

Литература

1. Гринес В. З., Калай Х. Х. Диффеоморфизмы двумерных многообразий с пространно расположенными базисными множествами // Успехи математических наук. 1985. Т. 40. №. 1 (241). С. 189-190.
2. Плыкин Р. В. О топологии базисных множеств диффеоморфизмов Смейла // Математический сборник. 1971. Т. 84. №. 2. С. 301-312.

MSC2020 37E30

On the topological structure of ambient surfaces for A -diffeomorphisms with one-dimensional attractors and repellers

V. Z. Grines, D. I. Mints
HSE University

УДК 515.162.2

О бифуркациях в однопараметрических семействах диффеоморфизмов, приводящих к рождению одномерных базисных множеств *

Гринес В. З., Минц Д. И., Петрова Ю. Э.

Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»

В данном докладе численно исследуются однопараметрические семейства диффеоморфизмов $F_{1\epsilon}$ и $F_{2\epsilon}$ двумерного и трехмерного торов соответственно, которые задаются с помощью суперпозиции прямых произведений отображений Мёбиуса и алгебраических автоморфизмов торов. Находятся бифуркационные значения параметров, при переходе через которые рождаются одномерные базисные множества.

Отображение Мёбиуса представляет собой диффеоморфизм окружности, зависящий от единственного параметра $\epsilon \in (-1; 1)$, и имеет следующую структуру: при $\epsilon = 0$ оно является тождественным; при $\epsilon \neq 0$ оно является диффеоморфизмом Морса-Смейла с двумя неподвижными точками: источник и сток. Естественным образом определяются прямое произведение двух отображений Мёбиуса и прямое произведение трех отображений Мёбиуса, действующие на двумерном и трехмерном торах соответственно. Прямое произведение двух отображений Мёбиуса при $\epsilon \neq 0$ является диффеоморфизмом Морса-Смейла, при этом его неблуждающее множество состоит из 4-х неподвижных точек: источниковой, стоковой и двух седловых. Прямое произведение трех отображений Мёбиуса, являющееся при $\epsilon \neq 0$ диффеоморфизмом Морса-Смейла, имеет неблуждающее множество, состоящее из 8-ми неподвижных точек: источниковой, стоковой и шести седловых.

Для однопараметрического семейства $F_{1\epsilon}$, заданного суперпозицией прямого произведения двух отображений Мёбиуса и алгебраического автоморфизма Аносова, численно получены следующие результаты. При $\epsilon \in (\epsilon^*; 0]$ (ϵ^* -бифуркационное значение параметра) диффеоморфизмы семейства являются топологически сопряженными диффеоморфизмами Аносова. При $\epsilon = \epsilon^*$ диффеоморфизм семейства уже не является структурно устойчивым, но топологически сопряжен диффеоморфизму Аносова. При переходе через значение параметра ϵ^* происходит бифуркация «вилка», в результате которой седловая неподвижная точка диффеоморфизма Аносова меняет свой тип и становится источником, а в ее окрестности рождаются две седловые неподвижные точки. При значениях параметра ϵ из интервала $(-0.5; \epsilon^*)$ неблуждающее множество диффеоморфизмов семейства $F_{1\epsilon}$ состоит из источниковой неподвижной точки и одномерного аттрактора.

Также с помощью численного эксперимента исследовано однопараметрическое семейство $F_{2\epsilon}$, заданное суперпозицией прямого произведения трех отображений Мёбиуса и алгебраического автоморфизма. Установлено, что при $\epsilon \in (\epsilon^*; 0]$ (ϵ^* -бифуркационное значение параметра) неблуждающее множество диффеоморфизмов из данного семейства состоит из двух базисных множеств, гомеоморфных двумерному тору, одно из которых является притягивающим, другое - отталкивающим, а ограничение $F_{2\epsilon}|_{T^2}$ на каждый из этих торов является диффеоморфизмом Аносова. При переходе через значение параметра ϵ^* происходит две бифуркации «вилка». При $\epsilon \in (-0.5; \epsilon^*)$ неблуждающее множество диффеоморфизмов

* Публикация подготовлена в ходе проведения исследования (№ 21-04-004) в рамках Программы «Научный фонд Национального исследовательского университета «Высшая школа экономики» (НИУ ВШЭ)» в 2021–2022 гг.

семейства $F_{2\epsilon}$ состоит из двух нетривиальных поверхностных базисных множеств (одномерный аттрактор и одномерное седловое базисное множество) и двух тривиальных базисных множеств (источниковая и седловая неподвижные точки).

MSC2020 37E30

On bifurcations in one-parameter families of diffeomorphisms that lead to the generation of one-dimensional basic sets

V. Z. Grines, D. I. Mints, Y. E. Petrova

HSE University

УДК 519.63

Численное исследование спектральных свойств периодического массива квантовых точек с гексагональной решёткой, помещённого в однородное магнитное поле

Гришанов Е. Н., Грязева О. С.

Национальный исследовательский Мордовский государственный университет

Периодические массивы наноразмерных объектов различной структуры в последнее время привлекают пристальное внимание специалистов в качестве источника новых материалов, обладающих уникальными свойствами. Особое внимание уделяется структурам с различной геометрией решётки на основе квантовых точек. Исследователям удалось создать такие массивы как с квадратной [1] так и с гексагональной [2, 3] решёткой и экспериментально изучить их свойства в магнитных полях. В этой связи представляется актуальным построение и исследование свойств математических моделей массивов квантовых точек различной геометрии в магнитных полях.

Будем рассматривать периодический массив квантовых точек на плоскости, помещённый во внешнее перпендикулярное однородное магнитное поле \mathbf{B} . Для удобства будем отождествлять точки плоскости массива с точками комплексной плоскости \mathbb{C} . Тогда решётка периодов массива квантовых точек может быть описана при помощи множества

$$\Omega = \{\lambda \in \mathbb{C} : \lambda = \lambda_1 \omega_1 + \lambda_2 \omega_2, \lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{Z}\},$$

где $\omega_1, \omega_2 \in \mathbb{C}$ – образующие решётки. В гексагональном случае решётка Ω будет ромбической с образующими: $\omega_1 = l$, $\omega_2 = le^{\frac{\pi}{3}i}$, а кристаллическая решётка массива $\Gamma = \Omega + K$, где $K = \{0, b\}$, $b = \frac{2}{3}(\omega_1 + \omega_2)$. Считаем, что в каждом узле решетки Γ расположена квантовая точка, площадь которой равна $\frac{1}{4}$ площади элементарной ячейки, l – сторона ромба. Через F_λ будем далее обозначать элементарную ячейку, отвечающую $\lambda \in \Omega$.

Выберем векторный потенциал поля \mathbf{B} в виде

$$A_1(z) = -\frac{B}{2}Im(z), \quad A_2(z) = \frac{B}{2}Re(z), \quad A_3(z) = 0, \quad z \in \mathbb{C}.$$

Тогда гамильтониан свободной заряженной частицы в массиве квантовых точек можно формально записать в виде следующего дифференциального оператора

$$H^0 = \frac{1}{2m^*} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A}(z) \right)^2 + V(z), \quad (1)$$

где m^* – эффективная масса частицы, e – ее заряд, c – скорость света, а $V(z) = \sum_{\gamma \in \Gamma} V_\gamma(z)$ – потенциал конфайнмента массива квантовых точек. Будем считать, что все квантовые точки одинаковы и имеют параболический потенциал конфайнмента, тогда $V_\gamma(z) = \frac{\hbar^2 |z - \gamma|^2}{2m^* d^4}$, где d – характерный размер квантовой точки. Далее будем использовать систему единиц, где $\hbar = e = c = 1$, $m^* = \frac{1}{2}$.

Очевидно, что оператор (1) не является самосопряженным. Для построения математической модели воспользуемся процедурой сужения-расширения, предложенной в [4]. Рассмотрим сужение S оператора H^0 на пространство $\mathcal{D} = \bigoplus_{\lambda \in \Omega} C_0^\infty(F_\lambda \setminus \{\lambda + K\})$. Будем искать резольвенту R_A гамильтониана модели H как самосопряжённое расширение S при помощи формулы М. Г. Крейна для резольвент [5]

$$R_A(z) = R_0(z) - B(z)[Q(z) - A]^{-1}B^*(\bar{z}), \quad (2)$$

где R_0 – резольвента невозмущённого оператора, B и Q – Γ - и Q - функции Крейна соответственно, A – самосопряжённый оператор в пространстве граничных значений, параметризующий расширения (в нашем случае его можно считать изоморфным $l^2(\Omega) \otimes \mathcal{G}_K$, $\dim \mathcal{G}_K = |K|$). Среди всех расширений нас интересуют только те, которые будут инварианты относительно операторов представления дискретной группы магнитных трансляций по решетке Ω с образующими $T_j\psi(z) = e^{\pi i \text{Im}(B\omega_j z)}[\omega_j]\psi(z)$, где $[\cdot]$ – обычная трансляция по решётке. Этот факт даёт нам следующее условие на матрицу оператора A

$$A(\gamma, \gamma') = \exp(\pi i \xi \text{Im}(\overline{(\gamma' - \gamma)}(\gamma' - k)))A(\gamma - \gamma' + k, k), \quad (3)$$

где $\gamma, \gamma' \in \Gamma$, $k \in K$, ξ – плотность потока магнитного поля \mathbf{V} . Также будем считать, что в рассматриваемой нами модели туннелирование заряженной частицы возможно только в соседнюю квантовую точку, что даёт нам дополнительное условие

$$A(u, b) = \begin{cases} \alpha, & u = \omega_1, \omega_2, \omega_1 + \omega_2, \\ 0, & \text{во всех остальных случаях,} \end{cases} \quad (4)$$

α – константа, выбираемая из физических соображений.

В случае рациональных значений магнитного потока $\Phi = N/M$ ($N \in \mathbb{Z}, M \in \mathbb{N}$) через элементарную ячейку решётки Ω возможно провести разложение оператора H в прямой интеграл по спектру неприводимых представлений группы магнитных трансляций и свести исследование спектра оператора H к решению т. н. дисперсионного уравнения

$$\det[\tilde{Q}(\mathbf{p}, z) - \tilde{A}(\mathbf{p})] = 0, \quad (5)$$

где $\mathbf{p} \in \mathbb{T}_\Phi^2 = [0, 1/M) \times [0, 1)$, матрицы $\tilde{Q}(\mathbf{p}, z)$ и $\tilde{A}(\mathbf{p})$ – самосопряжённые конечной размерности $2M \times 2M$. Блоки матрицы $\tilde{Q}(\mathbf{p}, z)$ находим, используя результаты [4] и [6], а элементы $\tilde{A}(\mathbf{p})$ определяем из условий (3) и (4) и результатов [4].

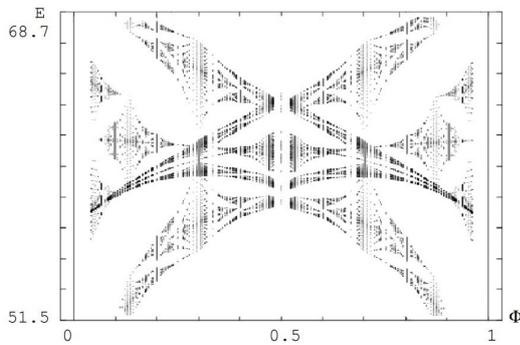


Рис. 1. Диаграмма «поток-энергия» для гексагональной решётки

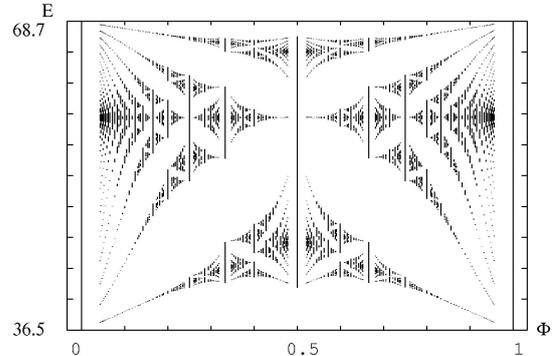


Рис. 2. Диаграмма «поток-энергия» для квадратной решётки

Из (2) ясно, что спектр гамильтониана H модели будет состоять из двух частей: бесконечно вырожденных собственных значений

$$E_{nm} = \sqrt{B^2 + \frac{2}{d^2}(|m| + 1 + 2n)} + Bm, \quad (n \in \mathbb{N}, m \in \mathbb{Z}, m \neq 0, -1)$$

гамильтониана одиночной квантовой точки, и решений уравнения (5). Поскольку матрицы \tilde{A} и \tilde{Q} получены в явном виде, для решения уравнения (5) можно использовать стандартные численные методы линейной алгебры. В результате проведённых вычислений для $\alpha = 0.1$ была получена диаграмма зависимости энергии E заряженной частицы от потока Φ однородного магнитного поля в моделируемой системе, приведённая на рис. 1. Из диаграммы видно, что для рациональных значений потока Φ каждая из зон спектра распадается на $2M$ подзон. Сравнение с аналогичной диаграммой для квадратной решётки (рис. 2) показывает, что в ширина зон становится меньше, число лагун в спектре увеличивается. Особенно отчётливо это заметно при $\Phi = 1/2$, где в случае квадратной решётки вообще отсутствуют лагуны в зоне проводимости. Кроме того, существенно меняется сама структура спектра.

Полученный результат показывает, что геометрия решётки оказывает значительное влияние на спектральные свойства периодического массива квантовых точек в однородном магнитном поле.

Литература

1. Micro and Nano Fabrication Technology. Springer. 2018. Vol. 1. 957 p.
2. Tianxiao Nie, Xufeng Kou at al. Superlattice of Fe_xGe_{1-x} nanodots and nanolayers for spintronics application // Nanotechnology. 2014. Vol. 25. 505702.
3. Jong-Ryul Jeong, Sarah Kim at al. Fabrication of Hexagonal Lattice Co/Pd Multilayer Nanodot Arrays Using Colloidal Lithography// Small. 2007. Vol. 3, No. 9. pp. 1529-1533.
4. Geyler V. A., Pavlov B. S., Popov I. Yu. One-Particle Spectral Problem for Superlattice with a Constant Magnetic Field // Atti Sem. Mat. Fis. Univ. Modena. – 1998. – Vol. XLVI. – pp. 79–124.
5. Крейн М. Г., Об эрмитовых операторах с дефект-индексами, равными единице // Докл. АН СССР. – 1944. – Т. XLII, № 8. – С. 57–63.
6. Попов А. В. Спектральные свойства периодических массивов квантовых точек и колец в магнитном поле: Дисс. ... канд. физ.-мат. наук. – Саранск, 2000. – 179 с.

MSC2020 35Q40

Numerical Analysis of the Spectral Properties of Quantum Dots Array with Hexagonal Lattice in a Uniform Magnetic Field

E. N. Grishanov, O. S. Gryazeva

National Research Mordovia State University

УДК 517.95

Об одной полунелокальной краевой задаче для трехмерного уравнения Трикоми в призматической неограниченной области

Джамалов С. З., Ашуров Р. Р., Туракулов Х. Ш.

Институт математики имени В. И. Романовского АНРУз

В работе А. В. Бицадзе показано, что задача Дирихле для уравнения смешанного типа некорректна [1]. Естественным образом возникает вопрос: возможна ли замена условия задачи Дирихле другими условиями, охватывающими всю границу, обеспечивающими корректность задачи? Впервые такие краевые задачи (нелокальные краевые задачи) для уравнения смешанного типа были предложены и изучены в работе Ф. И. Франкля при решении газодинамической задачи об обтекании профилей потоком дозвуковой скорости со сверхзвуковой зоной, оканчивающейся прямым скачком уплотнения [2]. Близкие по постановке задачи для уравнения Трикоми были исследованы в ограниченных областях в работах [3–7].

В данной работе с использованием результатов работ [6, 7] изучается однозначная разрешимость обобщенного решения одной полунелокальной краевой задачи для трехмерного уравнения Трикоми в призматической неограниченной области.

Рассмотрим уравнение Трикоми

$$Lu = xu_{tt} - \Delta u + a(x, t)u_t + c(x, t)u = f(x, t, z), \quad (1)$$

где $-\alpha < x < \beta$, $\Delta u = u_{xx} + u_{zz}$ – оператор Лапласа в области

$$Q = (-\alpha, \beta) \times (0, T) \times \mathbb{R} = \\ = Q_1 \times \mathbb{R} = \{(x, t, z); x \in (-\alpha, \beta), 0 < t < T < +\infty, z \in \mathbb{R}\}.$$

Пусть все коэффициенты уравнения (1) достаточно гладкие в области Q функции.

Сформулируем постановку полунелокальной краевой задачи. Требуется найти обобщенное решение $u(x, t, z)$ уравнения (1) из пространства $W_2^{2,3}(Q)$, удовлетворяющее следующим краевым условиям

$$\gamma D_t^p u|_{t=0} = D_t^p u|_{t=T}, \quad (2)$$

$$u|_{x=-\alpha} = u|_{x=\beta} = 0, \quad (3)$$

при $p = 0, 1$, где $D_t^p u = \frac{\partial^p u}{\partial t^p}$, $D_t^0 u = u$, γ – некоторое постоянное число, отличное от нуля, величина которого будет уточнена ниже.

Определение 1. Обобщенным решением задачи (1)-(3) будем называть функцию $u(x, t, z) \in W_2^{2,3}(Q)$, удовлетворяющую почти всюду уравнению (1) с условиями (2)-(3).

Теорема 1. Пусть выполнены следующие условия для коэффициентов уравнения (1):

$$2a(x, t) + \mu x > \delta_1 > 0, \quad \mu c(x, t) - c_t(x, t) > \delta_2 > 0$$

для всех $(x, t) \in \overline{Q_1}$, где $\mu = \frac{2}{T} \ln |\gamma| > 0$ при $|\gamma| > 1$, $a(x, 0) = a(x, T)$, $c(x, 0) = c(x, T)$.

Тогда для любой функции $f \in W_2^{1,3}(Q)$, такой что $\gamma \cdot f(x, 0, z) = f(x, T, z)$, существует единственное обобщенное решение задачи (1)-(3) из пространства $W_2^{2,3}(Q)$ и для нее справедливы следующие оценки:

$$I) \|u\|_{W_2^{1,3}(Q)}^2 \leq c_1 \|f\|_{W_2^{0,3}(Q)}^2,$$

$$II) \|u\|_{W_2^{2,3}(Q)}^2 \leq c_2 \|f\|_{W_2^{1,3}(Q)}^2,$$

где c_i – положительные, вообще говоря, разные постоянные числа, отличные от нуля.

Здесь через $W_2^{l,s}(Q)$ обозначено гильбертово пространство с нормой

$$\|u\|_{W_2^{l,s}(Q)}^2 = (2\pi)^{-1/2} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} (1 + |\lambda|^2)^s \cdot \|\hat{u}(x, t, \lambda)\|_{W_2^l(Q_1)}^2 d\lambda, \quad (A)$$

где $W_2^l(Q_1)$ – пространства Соболева, s и l – любые конечные положительные целые числа, а норма в пространстве Соболева $W_2^l(Q_1)$, определяется следующим образом

$$\|\vartheta\|_{W_2^l(Q_1)}^2 = \sum_{|\alpha| \leq l} \int_{Q_1} |D^\alpha \vartheta|^2 dx dt,$$

α – это мультииндекс, D^α – обобщенная производная по переменным x и t , а через

$$\hat{u}(x, t, \lambda) = (2\pi)^{-1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} u(x, t, z) e^{-i\lambda z} dz$$

обозначено преобразование Фурье функции $u(x, t, z)$.

Замечание. Результат справедлив для многомерного уравнения Трикоми.

Литература

1. Бицадзе А. В., Некорректность задачи Дирихле для уравнений смешанного типа, ДАН СССР. 1953. Т. 122, № 2. С. 167–170.
2. Франкль Ф. А., Обтекание профилей потоком дозвуковой скорости со сверхзвуковой зоной, оканчивающейся прямым скачком уплотнения // Прикладная математика и механика. 1956. Т. 20, № 2. С. 196–202.
3. Кальменов Т. Ш., О полупериодической задаче для многомерного уравнения смешанного типа // Дифференциальные уравнения. 1978. Т.14, № 3. С. 546–548.
4. Сабитов К. Б., Задача Дирихле для уравнений смешанного типа в прямоугольной области // Док. РАН, 2007. Т. 413, № 1. С. 23–26.
5. Цыбиков Б. Н., О корректности периодической задачи для многомерного уравнения смешанного типа // В. кн.: Неклассические уравнения математической физики. Новосибирск, 1986. С. 201–206.
6. Джамалов С. З., Об одной нелокальной краевой задаче с постоянными коэффициентами для многомерного уравнения смешанного типа первого рода // Вестник Самарского государственного технического университета, Сер. физ.-мат. науки, 2017, 21:4. С. 1–14.
7. Джамалов С. З., Ашуров Р. Р., О гладкости одной нелокальной краевой задачи для многомерного уравнения Чаплыгина в пространстве // Казахский математ. журнал. 2015. Т. 18, № 2. С. 59–70.

MSC2020 35M10

On a semi-nonlocal boundary value problem for the three-dimensional Tricomi equation in a prismatic unbounded domain

S. Z. Dzhamalov, R. R. Ashurov, Kh. Sh. Turakulov

Institute of Mathematics named after V. I. Romanovskiy Academy of Sciences of
Sciences of the Republic Uzbekistan

УДК 517.9

Достаточные условия разрешимости системы квазилинейных уравнений первого порядка со свободными членами

Донцова М. В.

Национальный исследовательский
Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского

Рассмотрим систему вида:

$$\begin{cases} \partial_t u(t, x) + S_1(u, v) \partial_x u(t, x) = f_1(t, x), \\ \partial_t v(t, x) + S_2(u, v) \partial_x v(t, x) = f_2(t, x), \end{cases} \quad (1)$$

где $u(t, x)$, $v(t, x)$ – неизвестные функции, f_1 , f_2 , S_1 , S_2 – известные функции.

Поставим для системы уравнений (1) задачу Коши, т. е. зададим начальные условия:

$$u(0, x) = \varphi_1(x), \quad v(0, x) = \varphi_2(x). \quad (2)$$

где $\varphi_1(x)$, $\varphi_2(x)$ – известные функции.

Задача (1), (2) определена на

$$\Omega_T = \{(t, x) | 0 \leq t \leq T, x \in (-\infty, +\infty), T > 0\}.$$

С помощью метода дополнительного аргумента проводится исследование разрешимости задачи Коши (1), (2) в области Ω_T . С помощью метода дополнительного аргумента и преобразований получена система интегральных уравнений [1]:

$$w_1(s, t, x) = \varphi_1(x - \int_0^t S_1(w_1, w_3) d\nu) + \int_0^s f_1(\nu, x - \int_\nu^t S_1(w_1, w_3) d\tau) d\nu, \quad (3)$$

$$w_2(s, t, x) = \varphi_2(x - \int_0^t S_2(w_4, w_2) d\nu) + \int_0^s f_2(\nu, x - \int_\nu^t S_2(w_4, w_2) d\tau) d\nu, \quad (4)$$

$$w_3(s, t, x) = w_2(s, s, x - \int_s^t S_1(w_1, w_3) d\nu), \quad (5)$$

$$w_4(s, t, x) = w_1(s, s, x - \int_s^t S_2(w_4, w_2) d\nu). \quad (6)$$

Обозначим $\bar{C}^{1,2,2}(\Omega_T)$ – пространство функций, один раз дифференцируемых по переменной t , дважды дифференцируемых по переменной x , имеющих смешанные производные второго порядка и ограниченные вместе со своими производными на Ω_T ; $\bar{C}^{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n}(\Omega_*)$ – пространство функций, определенных, непрерывных и ограниченных вместе со своими производными до порядка α_m по m -му аргументу, $m = \overline{1, n}$ на неограниченном подмножестве $\Omega_* \subset R^n$, $n = 1, 2, \dots$,

$$C_\varphi = \max\{\sup_R |\varphi_i^{(l)}| | i = 1, 2, l = \overline{0, 2}\}, \quad C_f = \max\{\sup_{\Omega_T} |f_i|, \sup_{\Omega_T} |\partial_x f_i|, i = 1, 2\},$$

$$Z_K = \{(u, v) | u, v \in [-K, K]\}, \quad \text{где } K \text{ – положительное число.}$$

Основной результат исследования сформулирован как теорема [1]:

Теорема 1. Пусть $\varphi_i \in \bar{C}^2(R), i = 1, 2, f_1, f_2 \in \bar{C}^{2,2}(\Omega_T), S_1, S_2 \in \bar{C}^{2,2}(Z_K), K = C_\varphi + TC_f$ и выполняются условия:

$$\partial_u S_1 < 0, \partial_v S_1 < 0, \partial_u S_2 < 0, \partial_v S_2 < 0 \text{ на } Z_K,$$

$$\varphi'_1(x) \leq 0, \varphi'_2(x) \leq 0 \text{ на } R, \partial_x f_1 \leq 0, \partial_x f_2 \leq 0 \text{ на } \Omega_T.$$

Тогда для любого $T > 0$ задача Коши (1), (2) имеет единственное решение

$$u(t, x), v(t, x) \in \bar{C}^{1,2,2}(\Omega_T),$$

которое определяется из системы интегральных уравнений (3)-(6).

В теореме 1 сформулированы условия нелокальной разрешимости задачи Коши (1), (2), где $u(t, x) = w_1(t, t, x), v(t, x) = w_2(t, t, x)$.

Литература

1. Донцова М. В. Достаточные условия нелокальной разрешимости системы двух квазилинейных уравнений первого порядка со свободными членами // Известия Института математики и информатики Удмуртского государственного университета. 2020. Т. 55. С. 60–78.

MSC2020 35F50, 35F55, 35A01, 35A02, 35A05

Sufficient conditions of a solvability for a system of quasilinear equations of the first order with constant terms

M. V. Dontsova

National Research Lobachevsky State University of Nizhny Novgorod

УДК 004.02

Моделирование процесса синтеза метил-трет-бутилового эфира*

Дубовцев Д. А.¹, Еникеева Л. В.^{2,3}

Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН¹,
Новосибирский государственный университет²,
Уфимский государственный нефтяной технический университет³

В настоящий момент используются различные композиции автомобильных бензинов с пониженным содержанием аренов, в которых уменьшение суммарного количества ароматических углеводородов достигается добавлением кислородсодержащих соединений (оксигенатов) и углеводородных разбавителей. Широкое применение среди оксигенатов получил метил-трет-бутиловый эфир (МТБЭ). МТБЭ позволяет получать товарные бензины с высокой детонационной стойкостью и стабильностью, с уменьшенным нагарообразованием, пониженной токсичностью [1].

За основу для моделирования реактора синтеза МТБЭ была взята диффузионная модель реактора. В данной модели учитывается неравномерность распределения параметров процесса по всему объему, а также осевое перемешивание реагируемых сред. В реальном реакторе перемешивание происходит как в продольном, так и в радиальном направлениях, но учет этих типов диффузии сильно усложняет уравнения диффузионной модели [2], поэтому предполагается, что распределение концентрации равномерно в радиальном направлении, а диффузия происходит только вдоль оси реактора.

Математическая модель представляет собой дифференциальные уравнения в частных производных, при этом только некоторые из уравнений имеют аналитическое решение. В связи с этим возникает необходимость искать приближенные решения с использованием различных численных методов. Достаточно эффективным методом численного решения задач математического моделирования является метод конечных разностей или метод сеток, позволяющий сводить приближенное решение уравнений в частных производных к решению систем алгебраических уравнений. Системы алгебраических уравнений при этом формулируются для приближенных значений решения в некотором наборе точек в расчетной области [2].

Поставленная задача численного расчета процесса синтеза метил-трет-бутилового эфира решена с использованием метода конечных разностей.

Литература

1. Царева З. М., Орлова Е. А. Теоретические основы химтехнологии. Киев: Высшая школа, 1986. 271 с.
2. Kennedy J., Eberhart R. C. Particle swarm optimization, Proceedings of IEEE International Conference on Neural Networks, Piscataway, NJ, 1995. pp. 1942–1948.
3. A. Tikhonov. Equations of mathematical physics. Nauka, Moscow, 1972. 256 с.

*Работа выполнена при частичной финансовой поддержке гранта РФФИ проект №19-37-60014

MSC2020 35-04

Optimization of the synthesis process of methyl tert-butyl ether by developing a mathematical model

D. A. Dubovtsev¹, L. V. Enikeeva^{2,3}

Institute of Petrochemistry and Catalysis of the Russian Academy of Sciences¹,
Novosibirsk State University²,
Ufa State Petroleum Technological University³

УДК 51-72+538.91

Условия роста периодических структур под облучением в модели «Быстрая релаксация-медленная диффузия»*

Журавлев В. М., Морозов В. М.

Самарский государственный аэрокосмический университет
имени академика С. П. Королёва (национальный исследовательский университет)

Настоящая работа посвящена исследованию условий возникновения под действием внешнего излучения периодических структур в кристаллических материалах. Во множестве экспериментальных работ показано, что при облучении кристаллов частицами, либо электромагнитным излучением на их поверхности и в объеме могут образовываться упорядоченные структуры – сверхрешетки, представляющие собой скопления точечных дефектов кристаллической решетки, таких как вакансии, межузельные атомы, атомы примесей и т. д. [1]. При этом наблюдается изменение свойств материала как в лучшую (увеличение твердости, прочности, радиационной стойкости и т. д.), так и в худшую сторону (охрупчивание, растрескивание, рост электрического сопротивления). В связи с этим задача о выяснении условий, при которых материалы под облучением меняют свою структуру, является актуальной задачей радиационной физики и реакторной техники, а также имеет важное значение для получения материалов с заданными свойствами.

При взаимодействии частиц излучения с кристаллической решеткой, происходит генерация пар дефектов вакансии-межузелье и дальнейшая их миграция (диффузия) с возможностью взаимной рекомбинации и выхода на стоки (граница кристалла, границы зерен, дислокации и пр.). Математически, все эти процессы могут быть описаны системой кинетических уравнений для соответствующих компонент (типов дефектов). Данные уравнения представляют собой уравнения диффузии с нелинейным источником в правой части.

Новизна предлагаемой модели, в том числе, заключается в рассмотрении уравнений, содержащих коэффициент диффузии, зависящий от концентрации дефектов, что приводит к нелинейной диффузии. Ранее было показано наличие у таких уравнений решений, описывающих упорядоченные структуры [2].

Сверхрешетки обладают следующими характерными особенностями: период значительно превосходит постоянную решетки материала [1], время роста значительно превосходит характерные времена процессов релаксации (генерации и рекомбинации). Исходя из того, что в такой системе наблюдается естественное разделение масштабов, для анализа системы уравнений можно применить метод многомасштабных разложений. В работе показано, что с помощью данного метода можно получить условие роста начального периодического распределения и оценить масштаб сверхрешетки.

В основу рассматриваемой модели положено уравнение диффузии точечных дефектов в кристалле. Рассмотрим предлагаемый метод анализа на примере уравнения для одного типа дефектов:

*Работа выполнена в рамках проекта 0777-2020-0018, финансируемого из средств государственного задания победителям конкурса научных лабораторий образовательных организаций высшего образования, подведомственных Минобрнауки России и частично в рамках проекта РФФИ 20-02-00280

$$\frac{\partial n}{\partial \tau} = \sum_{\alpha=1}^3 \frac{\partial}{\partial z^\alpha} \left(D(n) \frac{\partial n}{\partial z^\alpha} \right) - \mu n + \gamma J(n) + G. \quad (1)$$

Здесь $D(n)$ – коэффициент диффузии как функция концентрации, слагаемое $J(n)$ учитывает эффекты связанные с взаимной рекомбинацией, а величина G описывает источник дефектов.

После обезразмеривания уравнение принимает вид:

$$\xi_t = \Delta F(\xi) - \xi + \varepsilon P(\xi) + g, \quad (2)$$

где $F(\zeta) = \frac{D_0}{a^2|\mu|} \frac{1}{N_0} \int^{\zeta N_0} \frac{D(n)}{D_0} dn$, $P(\xi) = J(N_0 \xi)$, $g = \frac{G}{(|\mu|N_0)}$. Безразмерный коэффициент $\varepsilon = \gamma(\mu N_0)^{-1}$ в данном варианте модели считается малым параметром (слабая рекомбинация) и определяет масштаб возникающей структуры.

Как отмечалось выше, в данной системе наблюдается разделение пространственных и временных масштабов, поэтому наряду со стандартными «быстрыми» переменными t и \mathbf{x} введем «медленные» переменные $\mathbf{X} = \sqrt{\varepsilon} \mathbf{x}$, $T = \varepsilon t$.

В этом случае зависимость функции ξ от координат и времени может быть представлена в виде ряда разложения по малому параметру ε :

$$\xi(\mathbf{x}, t, \varepsilon) = \xi_0(t, \mathbf{X}, T) + \xi_1(t, \mathbf{X}, T)\varepsilon + O(\varepsilon^2). \quad (3)$$

Подставляя разложение функции ξ в уравнение (2) и приравнявая нулю коэффициенты при различных степенях ε , получаем следующие решения в первых двух порядках:

$$\xi_0 = A(\mathbf{X}, T)e^{-t} + g(\mathbf{X}, T), \quad (4)$$

$$\xi_1 = A_1(\mathbf{X}, T)e^{-t} + e^{-t} \int_0^t e^{t'} \left[-\frac{\partial \xi_0}{\partial T} + \Delta_{\mathbf{X}} F(\xi_0) - \xi_0^2 \right] dt', \quad (5)$$

где $A(\mathbf{X}, T)$ – постоянная интегрирования, в данном случае, зависящая от медленных переменных. Функцию $A(\mathbf{X}, T)$ и аналогичные ей функции будем называть **амплитудными факторами релаксации (АФР)**.

Интеграл в решении для ξ_1 содержит пропорциональные t «резонансные» слагаемые, условием обращения их в ноль является уравнение для АФР $A(\mathbf{X}, T)$:

$$\frac{\partial A}{\partial T} = \Delta_s (\mathcal{D}(g)A) + P'(g)A. \quad (6)$$

Данное уравнение записано для функции медленных переменных и описывает рост крупномасштабной структуры. Особенностью уравнения (6) является его линейность, при том, что исходное уравнение было существенно нелинейным. При этом коэффициенты уравнения зависят от величины безразмерного источника дефектов.

В случае постоянного источника, что соответствует начальной стадии облучения в тонком слое, когда присутствие дефектов не влияет на процесс их генерации, решение уравнения (6) следует искать в виде суперпозиции решений вида:

$$A(\mathbf{X}, T) = e^{pT} e^{-QZ} \left(A_0 \cos(\mathbf{K}, \mathbf{X}) + B_0 \sin(\mathbf{K}, \mathbf{X}) \right), \quad (7)$$

где инкремент медленного роста p связан с волновым вектором $\mathbf{K} = (K_X, K_Y)$ по медленным координатам X, Y и декрементом затухания $Q > 0$ по координате Z соотношением:

$$p = P'(g) - (\mathbf{K}^2 - Q^2) \mathcal{D}(g). \quad (8)$$

Подставляя решение для $A(\mathbf{X}, T)$ в решение (4), находим:

$$\xi_0 = e^{\delta t} e^{-QZ} \left(A_0 \cos(\mathbf{K}, \mathbf{X}) + B_0 \sin(\mathbf{K}, \mathbf{X}) \right) + g. \quad (9)$$

Здесь $\delta = p\varepsilon - 1$ – безразмерный параметр роста. Условием роста периодических составляющих является требование $\delta > 0$, которое после подстановки (8), приобретает форму неравенства:

$$k_0^2 = \frac{\gamma J' \left(\frac{G}{\mu} \right) - \mu}{D \left(\frac{G}{\mu} \right)} + q^2 \geq k^2, \quad (10)$$

которое является условием для волновых чисел начального распределения и позволяет оценить масштаб возникающей структуры.

Как правило, источник дефектов G в кинетических уравнениях отождествляется с внешним источником облучения, однако это верно только при некоторых условиях. В общем случае, наличие дефектов в кристаллической решетке влияет на процесс их генерации и источник в уравнении должен это учитывать. Обобщение модели, предложенной выше, заключается в рассмотрении источника частиц в качестве еще одной неизвестной функции, удовлетворяющей уравнению переноса излучения (частиц) в среде. Данное уравнение можно записать в таком виде:

$$g_\tau + \operatorname{div} \vec{J} = -\tilde{\lambda}_c(N_0 - n_v)g - \tilde{\lambda}_i n_i g - \tilde{\kappa} g, \quad (11)$$

где $g(\mathbf{x}, t)$ – концентрация налетающих частиц в среде. Первое слагаемое в правой части учитывает взаимодействие налетающей частицы с решеткой, где $N_0 - n_v$ – концентрация занятых узлов, а $\tilde{\lambda}_c$ – интенсивность взаимодействия. Слагаемое $-\tilde{\lambda}_i n_i g$ учитывает потерю энергии налетающей частицы (фактически ее выбывание из генерации) при столкновении с межузельным атомом, а $-\tilde{\kappa} g$ – рассеяние обусловленное прочими факторами.

В безразмерной форме система уравнений для пары дефектов и частиц излучения приобретает вид:

$$\begin{cases} h_t = -\frac{1}{\varepsilon^2} \frac{\partial h}{\partial z} - (1 - v)h - \lambda u h - \varepsilon \kappa h, \\ v_t = (1 - v)h - \gamma u v - \varepsilon \mu_v v + \nabla [D_v(N_0 v, N_0 u) \nabla v], \\ u_t = (1 - v)h - \gamma u v - \varepsilon \mu_i u + \nabla [\tilde{D}_i(N_0 v, N_0 u) \nabla u], \end{cases}$$

где $v = \frac{n_v}{N_0}$, $u = \frac{n_i}{N_0}$, $h = \frac{g}{N_0}$ – безразмерные концентрации вакансий, межузельий и налетающих частиц.

В нулевом порядке решения можно записать в таком виде

$$\begin{aligned} V_0 &= b + \frac{a}{1 - B e^{-a\gamma t}}, \\ U_0 &= V_0 + \frac{\nu^2 - A^2}{A} - \nu^2, \end{aligned} \quad (12)$$

где $\nu = G_0 \gamma$, $a = \frac{(\nu^2 + A^2(\mathbf{X}, T))}{A}$, $b = -\frac{\nu^2}{A}$.

Из (12) следует физический смысл функции $A(\mathbf{X}, T)$ – это асимптотика концентрации вакансий при $t \rightarrow \infty$. Отсюда следует два возможных механизма образования структуры. В первом случае структура является эволюцией некоторого начального распределения и описывается АФР $B(\mathbf{X}, T)$. Для ее наблюдения необходимо ограничить время облучения характерным временем релаксации в (12). Во втором случае, при больших временах облучения, структура описывается функцией $A(\mathbf{X}, T)$.

В работе предложена модель роста периодических структур в кристаллах под облучением, основанная на уравнениях нелинейной диффузии точечных дефектов. Предложенная модель позволяет получить критерии роста периодических структур, оценить их масштаб и вычислить диффузионный профиль. Показано наличие критического значения волнового числа структуры. Также разработана модель, учитывающая насыщение источника дефектов с ростом их концентрации.

Литература

1. Ghoniem, N., Walgraef, D. Zinkle, S. Theory and experiment of nanostructure self-organization in irradiated materials. *Journal of Computer-Aided Materials Design* 8, 1–38 (2001).
2. Журавлев В. М. Принцип суперпозиции и точные решения уравнения нелинейной диффузии // ТМФ, 2015. Т. 183, № 1. С. 36–50.
3. Doyle Peter J., Benensky Kelsa M., Zinkle Steven J. Modeling the impact of radiation-enhanced diffusion on implanted ion profiles, *Journal of Nuclear Materials*, 2018. Vol. 509. pp. 168-180.

MSC2020 35G50, 35K86

Conditions for the growth of periodic structures under irradiation in the «Fast relaxation-slow diffusion» model

V. M. Zhuravlev, V. M. Morozov
S.P. Korolev Samara National Research University

УДК 004.94

Обратная кинетическая задача при моделировании кинетики гидрирования полициклических ароматических углеводородов *

Загидуллин Ш. Г.¹, Коледина К. Ф.^{1,2}

Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН¹,
Уфимский государственный нефтяной технический университет²

На сегодняшний день актуальным вопросом является разработка детализированной кинетической модели процесса гидрирования полициклических ароматических углеводородов (деароматизация) с учетом всех необходимых показателей, выделением стадий и кинетических параметров, ведущих к образованию нафтенов [1]. Последующая разработка методики многокритериальной оптимизации (МКО) процесса деароматизации на основе кинетической модели позволит в зависимости от критериев оптимальности (например, для более глубокого гидрирования – полного насыщения) определять наилучшие условия проведения реакции [2]. Также применение разработанной кинетической модели возможно и для других промышленных задач (для расчета необходимого количества катализатора, габаритов реактора).

Основные реакции данного процесса – это гидрирование моноциклических ароматических углеводородов (бутилбензол), гидрирование бициклических ароматических углеводородов (нафталин, дифенил) и трициклических ароматических углеводородов (антрацен).

Для моделирования кинетики процесса на основе полученных данных, построено математическое описание на базе закона действующих масс, которое представляет собой систему дифференциальных уравнений с начальными данными.

Решение системы уравнений является прямой кинетической задачей. Для восстановления кинетических параметров процесса деароматизации была решена обратная кинетическая задача на основе экспериментальных данных.

Литература

1. Ахметов А.Ф., Ахметов А.В., Загидуллин Ш.Г., Шайжанов Н.С // Башкирский химический журнал. 2018. Т. 25, № 1. С. 96-98.
2. Коледина К. Ф., Коледин С. Н., Щаднева Н. А., Губайдуллин И. М. Кинетика и механизм каталитической реакции спиртов с диметилкарбонатом // Журнал физической химии, 2017. Т. 91, № 3. С. 422-428.

*Работа выполнена по теме «Разработка новых теоретических подходов и программного обеспечения для моделирования сложных химических процессов и поиска соединений с заданными физико-химическими свойствами» (Регистрационный номер: АААА-А19-119022290011-6)

MSC2020 80A30

Inverse kinetic problem in modeling the kinetics of hydrogenation of polycyclic aromatic hydrocarbons

Sh. G. Zagidullin¹, K. F. Koledina^{1,2}

Institute of Petrochemistry and Catalysis of RAS¹,
Ufa State Petroleum Technological University²

УДК 519.63:536.4

О численном моделировании формирования сферического слоя D-T смеси в микромишенях ЛТС

Кирейчева Е. Ю.¹, Веселова Е. А.¹, Дерюгин Ю. Н.¹, Мамедова Т. Ф.²

Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики¹,
Национальный исследовательский Мордовский государственный университет²

Управляемый термоядерный синтез является многообещающей технологией для производства энергии. В инерциально-термоядерном реакторе [1] для осуществления условий реакций синтеза сферическая микромишень, содержащая твердый слой изотопов водорода дейтерия (D2) и трития (T2), обжимается под воздействием лазерного излучения. Достижение необходимых параметров для зажигания мишени во многом определяется сферичностью твердого слоя D-T смеси. В процессе производства микромишеней при замораживании газонаполненной микросферы в результате влияния силы тяжести происходит несимметричное охлаждение мишени. В работах [2,3] отмечается, что вследствие энерговыделения при распаде трития в D-T смеси может происходить естественная симметризация твердого слоя.

Для оценки времени формирования твердого слоя в работе [4] была создана одномерная расчетная модель процесса замораживания газонаполненной микросферы. Данная модель представляет собой задачу Стефана с двумя фазовыми переходами с учетом потенциального движения замораживаемого газа. С использованием созданной методики были вычислены пространственно-временные распределения температуры внутри и вне сферы, скорость движения газа внутри сферы и время замораживания в широких пределах размеров микросфер, количества содержащегося в них газа и скорости охлаждения. Описание процесса естественной симметризации за счет внутренних источников энергии потребовало создания многомерной расчетной модели [2, 3]. Использование здесь разработанных многомерных коммерческих кодов [2, 3, 5] в силу разномасштабности газодинамических и тепловых процессов не позволило численно оценить время симметризации, которое может составлять несколько часов.

Целью данной работы явилось разработка экономичной методики расчета формирования криогенного слоя D-T смеси в микросфере на основе двумерного подхода и уравнений движения газовой фазы в приближении Буссинеска. Тепловая задача представляет собой задачу Стефана с фазовым переходом газ-твердое тело с выделением фронта фазового перехода на подвижной эйлеровой сетке. Используемые термодинамические свойства веществ в рассматриваемом диапазоне температур взяты из [6]. Разработанная методика основана на методе конечного объема и использовании структурированной подвижной сетки. Расчетный шаг расщепляется на три этапа. На первом этапе определяется скорость фазового фронта и новое положение сетки. На втором этапе определяются компоненты вектора скорости в газовой фазе D-T смеси из решения уравнений Навье-Стокса методом типа SIMPLE [7]. В этом методе вначале определяются предварительные значения компонент вектора скорости без учета градиента давления. Затем из условия выполнения уравнения неразрывности определяются давление и новые значения компонент вектора скорости. Получающиеся системы разностных уравнений решаются методом расщепления по направлениям с использованием скалярных прогонок. На третьем этапе решается уравнение теплопереноса, которое аппроксимируется неявной разностной схемой относительно приращения температуры. Здесь система разностных уравнений также расщепляется по направлениям на одномерные

уравнения, которые решаются методом прогонки. Приводятся результаты расчетов процесса симметризации для одной конструкции мишеней для различных степеней заполнения D-T смесью.

Литература

1. Николс Дж. Г. Осуществимость инерциально-термоядерного синтеза. УФН, Т. 143, № 3. С. 467-482.
2. Hoffer J.K., Foreman L.R. Radioactively Induced Sublimation in Solid Tritium. Phys. Rev. Lett. 1988. Vol. 60, No. 13. pp. 1310-1314.
3. Modeling the Temperature and Ice-Thickness Profiles Within OMEGA Cryogenic Targets. LLE Review, Volume LLE Review. 2002. Vol. 81, p. 14.
4. Deryugin Yu. N., Izgorodin V.M., Solomatina E. Yu. Numerical simulation of the freezing process of hydrogen isotopes in a spherical container. J. Moscow Phys. Soc. 9 (1999). 165-172.
5. Козелков А.С., Дерюгин Ю.Н., Зеленский Д.К., Глазунов В.А., Голубев А.А., Денисова О.В., Лашкин С.В., Жучков Р.Н., Тарасова Н.В., Сизова М.А. Многофункциональный пакет программ ЛОГОС для расчета задач гидродинамики и теплопереноса на многопроцессорных ЭВМ: базовые технологии и алгоритмы. // Супервычисления и математическое моделирование: Труды XII международного семинара. Саров, 11-15 октября 2010. С. 215-230.
6. Малков М.П. Справочник по физико-техническим основам криогеники. М.: Энергоатомиздат, 1985. 432 с.
7. Ferziger J.H., Peric M. Computational methods for fluid dynamics. -3., rev. ed. - Berlin; New York; Barcelona; Hong Kong; London; Milan; Paris; Tokyo: Springer, 2002.

MSC2020 76D05, 76M12

About numerical modeling of the formation of a spherical layer of D-T mixtures in LTS micro-targets

E. Yu. Kireicheva¹, E. A. Veselova¹, Yu. N. Deryugin¹, T. F. Mamedova²
Russian Federal Nuclear Center¹, National Research Mordovia State University²

MSC2020 74B20

Modeling the behavior of a bar under creep conditions and under finite deformations*

E. B. Kuznetsov, S. S. Leonov

Moscow Aviation Institute

The paper considers a metal rod of circular cross-section, the length of which is many times greater than its cross-section. A constant tensile force is applied to the rod, which sets the stress p at the initial moment of time. The rod is in creep conditions. In this one-dimensional case, the equilibrium equation takes the form

$$\frac{\partial \sigma}{\partial x} = 0,$$

therefore, the stress will be an arbitrary function that depends only on time: $\sigma = \sigma(t)$. Taking into account that at the initial moment $\sigma(0) = p$, we take this function in the simplest linear form $\sigma(t) = p + kt$, where k is some constant. In areas where irreversible deformations are absent, stresses can be calculated as

$$\sigma_{ij} = \frac{\rho}{\rho_0} \frac{\partial W}{\partial d_{ij}} (\delta_{ij} - 2d_{ij}),$$

where W is the elastic potential, ρ_0 is the density of the material in the undeformed state ($d_{ij} = 0$, temperature $T = const$), δ_{ij} are the Kronecker symbols. In an isothermal process deformation $W = W(d_{ij})$ and for an isotropic medium this function depends only on the invariants of the tensor d_{ij} : $W = W(J_1, J_2, J_3)$. It was shown in [1] that if this function is expanded in a Taylor series with respect to the free state, limiting ourselves to terms up to the third order in the components d_{ij}

$$W = \frac{\lambda}{2} J_1^2 + \mu J_2 + l J_1 J_2 + m J_1^3 + n J_3 + \dots$$

$$J_1 = d_{ii}, J_2 = d_{ik} d_{ki}, J_3 = d_{ik} d_{kj} d_{ji},$$

then we obtain the following dependence for calculating the stresses in the regions of reversible deformation

$$\begin{aligned} \sigma_{ij} = & (\lambda d_{kk} + l d_{st} d_{ts} + (3m - \lambda) d_{kk}^2 - (l + \lambda) d_{kk} d_{st} d_{ts} + \left(\frac{1}{2} \lambda - \right. \\ & \left. - 3m\right) d_{kk}^3) \delta_{ij} + 2(\mu + (l - \lambda - \mu) d_{kk} - (l + 2\mu) d_{st} d_{ts} + (\mu - 3m - \\ & \left. - l + \lambda) d_{kk}^2) d_{ij} + (3n - 4\mu - (4l + 3n - 4\mu) d_{kk}) d_{it} d_{tj} - 6n d_{it} d_{tp} d_{pj}. \end{aligned} \quad (1)$$

In (1) λ, μ, l, m, n are elastic constants of the medium, and the first two are the Lamé parameters: $\lambda = \frac{\nu E}{(1 - 2\nu)(1 + \nu)}$, $\mu = \frac{E}{2(1 + \nu)}$, ν – Poisson's ratio.

If in the expression for stresses in reversible deformation regions (1) we take into account only the linear dependence on the component of the total strain tensor d : $\sigma = (\lambda + 2\mu)d = p + kt$, then we get

$$d = \frac{p + kt}{\lambda + 2\mu} = \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2. \quad (2)$$

*This work was carried out with the financial support of the RFBR grant, project No. 19-08-00718

Let's introduce the replacement

$$\frac{\partial u}{\partial x} = z, \quad (3)$$

then equality (2) takes the form

$$z^2 - 2z + \frac{2(p + kt)}{\lambda + \mu} = 0.$$

This quadratic equation has roots

$$z_{1,2} = 1 \pm \sqrt{1 - \frac{2(p + kt)}{\lambda + \mu}},$$

from which it is reasonable to take positive. In what follows, we will need the ε - component of the total strain rates, equal to

$$\varepsilon = \frac{dz}{dt} = -\frac{k}{\sqrt{(\lambda + 2\mu)(\lambda + 2\mu - 2p - 2kt)}}. \quad (4)$$

If we take into account the quadratic dependence of the total strain tensor component d in the expression for stresses in the regions of reversible deformation (1), then we obtain the relation

$$\sigma = (\lambda + 2\mu)d + 3(l + m + n - \lambda - 2\mu)d^2 = p + kt$$

or the equation $a_1 d^2 + a_2 d - a_3 = 0$, where $a_1 = 3(l + m + n - \lambda - 2\mu)$, $a_2 = \lambda + 2\mu$, $a_3 = p + kt$.

Introducing the notation $b = \frac{a_2}{2a_1}$, $c = \frac{a_3}{a_1}$, we rewrite this equation in the form $d^2 + 2bd - c = 0$, the positive root of which will satisfy the relation

$$d = b + \sqrt{b^2 + c} = \frac{\partial u}{\partial x} - \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2,$$

which, taking into account the replacement (3), can be written in the form

$$z^2 - 2z + 2(b + \sqrt{b^2 + c}) = 0.$$

We are satisfied with the root of this equation $z = 1 + \sqrt{1 - 2(b + \sqrt{b^2 + c})}$, then the component of the total strain rates will take the form

$$\varepsilon = \frac{dz}{dt} = -\frac{k}{2a_1 \sqrt{1 - 2(b + \sqrt{b^2 + c})} \sqrt{b^2 + c}}. \quad (5)$$

In our case, the equation of transfer of elastic deformations [1] takes the form

$$\frac{de}{dt} = (\varepsilon - \gamma^c)(1 - e).$$

The creep of the rod is modeled by kinetic equations; therefore, the deformation process will be described by the following system of equations:

$$\begin{cases} \frac{de}{dt} = (\varepsilon - \gamma^c)(1 - e), \\ \frac{dp^c}{dt} = (1 - 2p^c)\gamma^c, \\ \frac{d\omega}{dt} = \frac{B}{A}\gamma^c. \end{cases} \quad (6)$$

Here

$$\gamma^c = \frac{A\sigma^n}{\omega^n(1-\omega)^n},$$

the p^c – component of the irreversible creep strain tensor; the γ^c – component of the creep strain rate; ω – parameter of the rod material damage; A, B, n – parameters of creep, ε – the component of the total strain rates can be calculated by the formula (4) or (5). We believe that the stresses in the bar, as in the classical theory, are completely determined by reversible deformations. At the initial moment of time $t = 0$, the rod is in an undeformed state, and the applied stress in a short time τ increases from 0 to p , and the initial conditions will be homogeneous. However, the τ interval is much shorter than the creep time t_* of the material, so the initial conditions can be taken as:

$$e(0) = \frac{p}{E}, \quad p^c(0) = 0, \quad \omega(0) = 0, \quad (7)$$

where E is the modulus of elasticity of the rod material. The system of equations (6) should be solved under the initial conditions (7) until the moment of time $t = t_*$, at which the damage parameter takes the value $\omega(t_*) = 1$, which determines the failure of the rod. The results were compared with the data obtained in [2] when studying the creep of rods with a diameter of 0.042 m made of steel grade St. 45.

References

1. A.A. Burenin, L.V. Kovtanyuk Large irreversible deformations and elastic aftereffect. Vladivostok: Dalnauka, 2013.
2. Kuznetsov E.B., Leonov S.S. Technique for selecting the functions of the constitutive equations of creep and long-term strength with one scalar damage parameter. Journal of Applied Mechanics and Technical Physics. 2016. Vol. 57, No. 2, pp. 369-377.

УДК 519.633.6+536.21+538.945

Математическое моделирование распределения температуры внутри пленки нитрида ниобия на основе двумерного уравнения теплопроводности

Кузьмичев Н. Д., Данилова Е. В., Васютин М. А.

Национальный исследовательский Мордовский государственный университет

На сегодняшний день широкое применение получили нитриды переходных металлов, нанесенные в виде тонких пленок. Например, пленки нитридов переходных металлов активно применяются в микроэлектронике, поскольку обладают уникальными изоляционными, полупроводниковыми, сверхпроводящими, оптическими и рядом других важных свойств.

При проведении экспериментов при исследовании вольтамперных характеристик (ВАХ) с целью определения сверхпроводящих параметров образцов пленок нитрида ниобия (NbN), они подвергаются воздействию тока высокой плотности. Этот процесс требует достаточного теплоотвода. В противном случае полученные результаты будут недостоверны в силу перегрева пленки. По этой причине математическое моделирование теплоотдачи пленок нитрида ниобия при пропускании через них тока является актуальной и практически важной задачей. Ранее для этого случая авторами была решена одномерная задача теплопроводности [1]. В настоящей работе выполнено математическое моделирование распределения температуры внутри пленки нитрида ниобия на основе двумерного уравнения теплопроводности с учетом расположения теплоотводящих контактов на поверхности пленки.

В интегрированной среде разработки Microsoft Visual Studio был написан код программы, которая решает двумерное неоднородное уравнение теплопроводности на языке C++ [2, 3]. Решением данного уравнения является распределение температуры $u(x, y, t)$ в системе пленка-подложка-термостат. Уравнение имеет вид:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = a^2 \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) + f(x, t), \quad (1)$$

где $a^2 = \frac{\lambda}{c_p \cdot \rho} = 4,3 \cdot 10^{-2} \text{ см}^2/\text{с}$ – коэффициент температуропроводности кварцевой подложки и пленки NbN, $c_p = 17 \text{ Дж}/(\text{кг} \cdot \text{К})$ – удельная теплоемкость подложки при 20 К [4], $\rho = 2,2 \text{ г}/\text{см}^3$ – плотность подложки, $\lambda = 0,16 \text{ Вт}/(\text{м} \cdot \text{К})$ – теплопроводность подложки при 20 К, u – температура пленки, t – время, x и y – координаты (начало отсчета находится на внешней от подложки плоскости пленки, оси направлены перпендикулярно в сторону подложки);

$$f(x, t) = \frac{P(x, t)}{c_{NbN} \cdot \rho_{NbN}};$$

$P(x, t)$ – объёмная плотность мощности источника тепла (пленки), $c_{NbN} = 17 \text{ Дж}/(\text{кг} \cdot \text{К})$ – удельная теплоемкость NbN пленки при $T = 14 \text{ К}$ (сумма решёточной и электронной теплоемкости), $\rho_{NbN} = 8,4 \text{ г}/\text{см}^3$ – плотность пленки. Учитывая, что сила тока линейно возрастает за время t_0 от 0 до $I_{max} = 1,12 \text{ А}$ (в нашем случае $t_0 = 0,25 \text{ мс}$), величина $P(x, t)$ определяется законом Джоуля-Ленца:

$$P(x, t) = \begin{cases} \rho \cdot j_0^2 \cdot t^2, & x \leq d, t \leq t_0; \\ 0, & x > d, t > t_0. \end{cases}$$

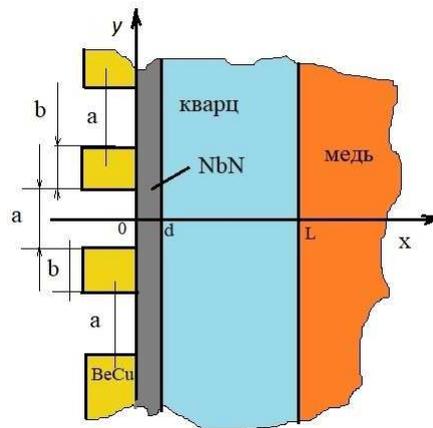


Рис. 1. Схема системы пленка-подложка-термостат.

Здесь $j_0 = \frac{I_{max}}{(d \cdot b \cdot t_0)}$, удельное сопротивление пленки в нормальном состоянии $\rho = 440 \mu\Omega \cdot \text{см}$, толщина пленки $d = 400$ нм и ширина пленки $b = 9$ мм. Начальным условием будет постоянная функция $u(x, y, 0) = 14$ К, которая определяет начальную температуру системы пленка-подложка. Задаем справа краевое условие первого рода, т. е. постоянную температуру: $u(L, y, t) = 14$ К. На левом конце заданы краевые условия третьего рода. Это обусловлено тем, что по закону Ньютона левая граница пленки посредством тепловых контактов находится в теплообмене со средой, имеющей температуру 14 К:

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)_{0,y,t} = H(y) \cdot [u(0, y, t) - 14].$$

Коэффициент теплообмена H зависит от y :

$$H(y) = \begin{cases} 0, & |y| \leq \frac{a}{2}; \\ H_0, & \frac{a}{2} < |y| \leq \frac{a}{2} + b; \\ 0, & \frac{a}{2} < |y| \leq \frac{3 \cdot a}{2} + b; \\ H_0, & \frac{3 \cdot a}{2} + b < |y|. \end{cases}$$

В межконтактной области $H = 0$, в области контакта $H = H_0 = 50 \mu\text{m}^{-1}$.

Для аппроксимации дифференциального уравнения (1) разностным методом введена пространственно-временная сетка с координатами $x_i = (i - 1) \cdot h_x$, $y_j = (j - 1) \cdot h_y$, $t_n = n \cdot \tau$, h_x, h_y – шаги сетки по координатам x и y соответственно; τ – шаг по времени; $i = 1, 2, \dots, N_x$, $j = 1, 2, \dots, N_y$, $n = 0, 1, 2, \dots, K$.

Дискретизация уравнения (1) проведена с использованием локальной одномерной схемой А. А. Самарского [2, 3], которая является абсолютно устойчивой и обладает свойством суммарной аппроксимации. Первый этап – дискретизация только в направлении оси x на промежуточном временном шаге, решение получившегося одномерного уравнения. Второй этап – аналогичные действия в направлении оси y , но на целом шаге по времени. Каждое

одномерное уравнение сведено к стандартному трехдиагональному виду и решено методом прогонки.

На рис. 2 представлен начальный момент времени. Импульс возрастает линейно в течении $250 \mu s$. Из полученных результатов, приведенных на рисунках 2a, 2b видно, что максимальная температура нагрева находится внутри пленки и наибольшее ее значение достигается в конце импульса.

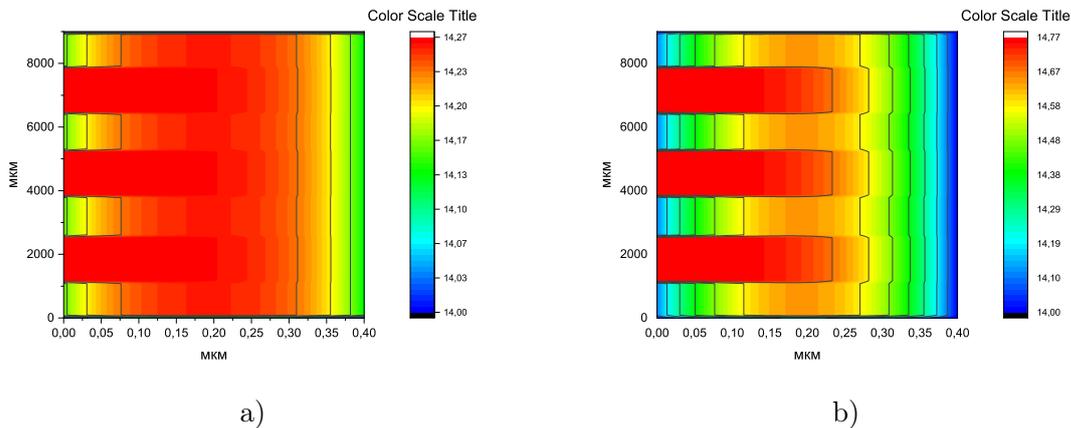


Рис. 2. Распределение тепла внутри пленки при $\tau = 100 \mu s$ (a), $\tau = 250 \mu s$ (b).

Результат работы программы выводится в виде матрицы размерности 100×100 элементов с шагом по времени $\tau = 100 \mu s$. После прекращения подачи импульса можно наблюдать незначительное изменение относительно конечного момента подачи (рис. 3a). Далее уже на пятой миллисекунде можно увидеть значительное охлаждение пленки до 14,03 К (рис. 3b).

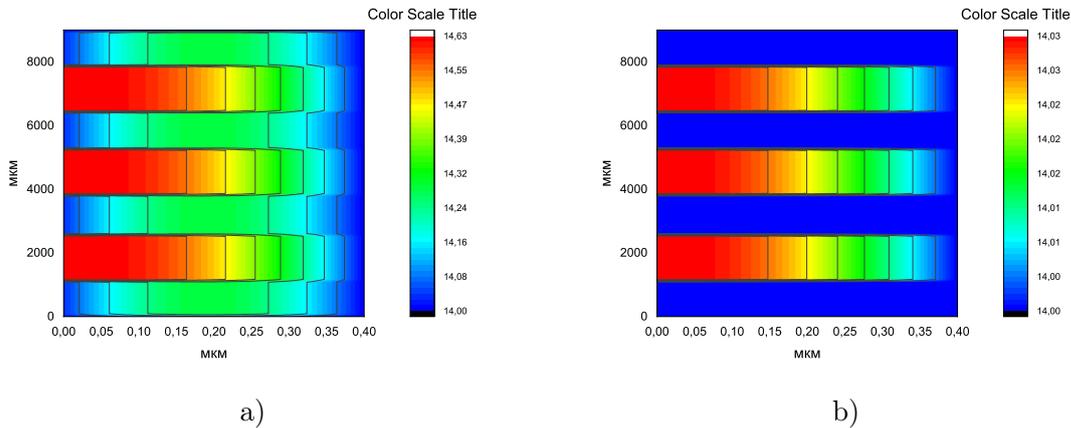


Рис. 3. Распределение тепла внутри пленки при $\tau = 400 \mu s$ в начале (a) и на 5-й ms (b).

На рис. 4 представлено изменение максимальной температуры внутри пленки нитрида ниобия в течении $20 ms$. Из графика видно, что температура достигает своего максимума в момент завершения подачи импульса.

Из полученных результатов можно сделать вывод, что моделирование процесса теплообмена пленки нитрида ниобия при нагревании импульсом тока на основе двумерного уравнения теплопроводности уточняет результаты предыдущей работы [1]. Таким образом, применение прижимных контактов из бериллиевой бронзы позволяет проводить исследование ВАХ сверхпроводников с токами высокой плотности ($10^4 - 10^5 \text{ A/cm}^2$) без значительного

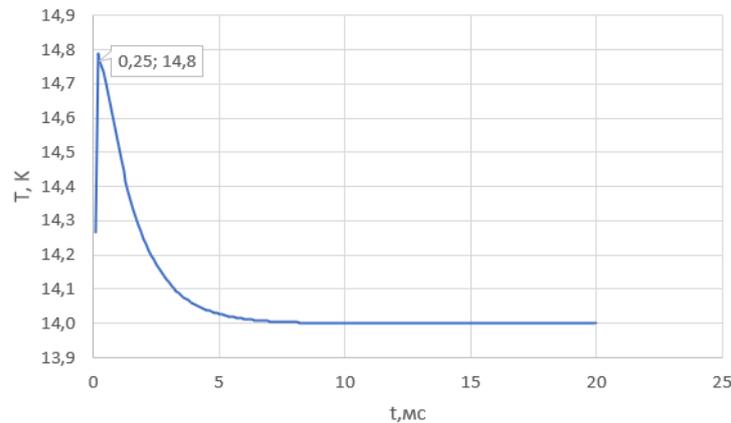


Рис. 4. Изменение максимальной температуры пленки NbN от времени.

нагрева образцов.

Литература

1. Кузьмичев Н.Д., Васютин М.А., Данилова Е.В., Лапшина Е.А. Математическое моделирование процесса теплоотдачи пленки нитрида ниобия при импульсном нагреве током. Журнал Средневолжского математического общества. 2021. Т. 23, № 1. С. 82-90.
2. Кузнецов Г.В., Шерemet М.А. Разностные методы решения задач теплопроводности: учебное пособие. Томск: Изд-во ТПУ, 2007. 172 с.
3. Формалев В.Ф., Ревизников Д.Л. Численные методы. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2006. – 406 с.
4. Таблицы физических величин. Справочник. Под ред. акад. И.К. Кикоина. М., Атомиздат. 1976, 1008 с.

MSC2020 35Q79

Mathematical modeling of the temperature distribution inside the niobium nitride membrane based on the two-dimensional heat conduction equation

N. D. Kuzmichev, E. V. Danilova, M. A. Vacutin
National Research Mordovia State University

УДК 519.633.6+536.21+538.945

Математическое моделирование пик-эффекта в осесимметричных жестких сверхпроводниках

Кузьмичев Н. Д., Шушпанов А. А., Васютин М. А., Лапшина Е. А.

Национальный исследовательский Мордовский государственный университет

В настоящее время жесткие сверхпроводники 2-го рода широко используются на практике. Для их применения необходимо учитывать их критические параметры. Эти характеристики можно получить экспериментально путем бесконтактных измерений. В последнее время используются материалы с гранулированной структурой, частицы которых в первом приближении можно считать сферами или эллипсоидами. Определение критических параметров образцов с помощью бесконтактных измерений – сложная задача. В свою очередь, актуальным вопросом является моделирование отклика сверхпроводящего образца на меняющееся магнитное поле. В работе рассмотрены задачи с осевой симметрией: короткие цилиндры и эллипсоиды вращения в полях, параллельных оси вращения. В этом случае достаточно провести расчет для осевого сечения, а экранирующий сверхток и вектор-потенциал имеют только азимутальную компоненту.

Плотность сверхтока зависит от силы пиннинга вихрей Абрикосова, которая в свою очередь, зависит от магнитного поля. Рассмотрим локальный случай, когда критическая плотность тока в точке зависит от поля в этой точке. В данной работе в качестве полевой зависимости плотности тока выбрана модель Кима:

$$J_c = \frac{J_{c0}}{\left(1 + \frac{|B|}{B_0}\right)} \quad (1)$$

Здесь B – индукция магнитного поля, B_0 – характерное поле и J_{c0} – критическая плотность тока при $B = 0$. Обычно критическая плотность тока монотонно убывает, но в некоторых сверхпроводниках наблюдается рост J_c при увеличении магнитного поля. Данная особенность получила название пик-эффект. В работе [1] предложено моделировать пик-эффект путем модификации полевой зависимости критического тока:

$$J_c(B) = J_{c0}(B)(1 + f_{peak}(B)) \quad (2)$$

В качестве пик-функции f_{peak} в работе будут использованы обобщенная колоколообразная, модифицированная Гауссова и экспоненциально-логарифмическая функции.

Рассмотрим изотропный локальный случай $\mathbf{V}(\mathbf{H}) = \mu_0 \mathbf{H}$ и вольтамперную характеристику $\mathbf{E} = \frac{E(J)\mathbf{J}}{J}$. Где \mathbf{H} – напряженность внешнего магнитного поля и \mathbf{E} – напряженность электрического поля, созданная внутри сверхпроводника изменяющимся магнитным потоком. Удельное сопротивление ρ аппроксимируем степенной функцией

$$\rho = \frac{E(J)}{J} = E_c \frac{\left(\frac{J}{J_c}\right)^n}{J},$$

где $n \geq 1$, границы образца $b \geq y \geq -b, r = (x^2 + y^2)^{0.5} \leq a(y)$, $a(y)$ – функция границы.

Основное уравнение движения плотности тока, интегральное по координатам и дифференциальное по времени приведено в работах [2, 3] и имеет вид:

$$\frac{dJ(\mathbf{r}, t)}{dt} = \mu_0^{-1} \int_0^a dr \int_0^b dy Q_{cyl}^{-1}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \left[E(J) - \frac{r'}{2} \dot{B}_a \right]. \quad (3)$$

Здесь $B_a = B_a(t)$ – индукция внешнего приложенного магнитного поля, зависящая от времени t по заданному закону, например, гармоническому или линейному, а $Q_{cyl}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ – ядро интегрального уравнения, выраженное через эллиптические функции [3, 4]. Для моделирования пик-эффекта воспользуемся функциями:

$$f_{peak}(B) = A / \left(1 + \left(\frac{|B| - B_p}{B_w} \right)^2 \right), \quad (4)$$

$$f_{peak} = A \frac{|B|}{B_p} \exp \left(- \frac{(|B| - B_p)^2}{2B_w^2} \right), \quad (5)$$

$$f_{peak} = A \cdot \exp \left(- \frac{(\ln |B|/B_p)^2}{2(B_w/B_p)^2} \right), \quad (6)$$

где B_p – поле, соответствующие максимуму пика, B_w – поле, характеризующее ширину пика, A – амплитуда пика.

На рис. 1 представлены зависимости критической плотности тока с использованием пик-функций (4)-(6).

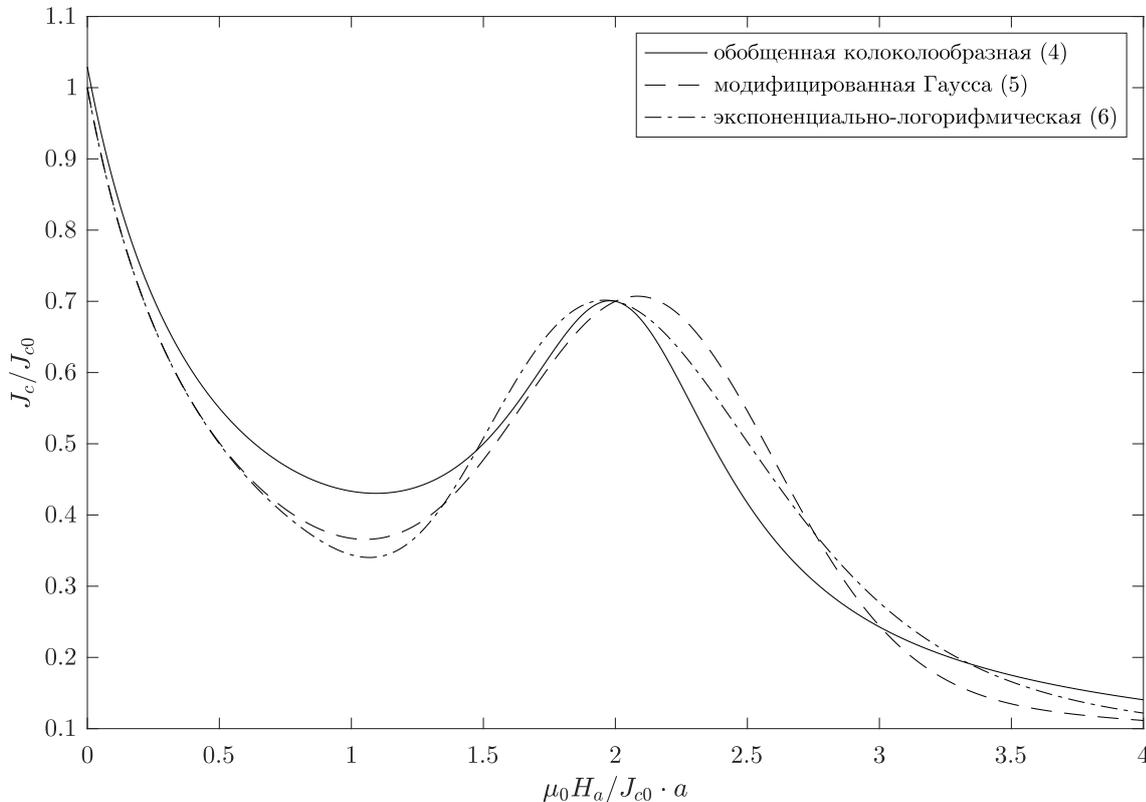


Рис. 1. Вид критической плотности тока при использовании пик-функций (4)-(6) с параметрами $A = 0.5 J_{c0}$, $B_p = 2 J_{c0} \cdot a$, $B_w = 0.5 J_{c0} \cdot a$

Расчеты проводились на шарообразном образце радиусом a . Плотность сетки составляет 15 точек на единицу размера. Внешнее поле выбрано линейно нарастающим. Показатель степени в вольтамперной характеристике выбран $n = 51$. Результаты расчетов приведены на рис. 1 и 2. При построении графиков напряженность внешнего магнитного поля нормирована на величину $J_c \cdot a$, магнитный момент – на $J_c \cdot a^4$.

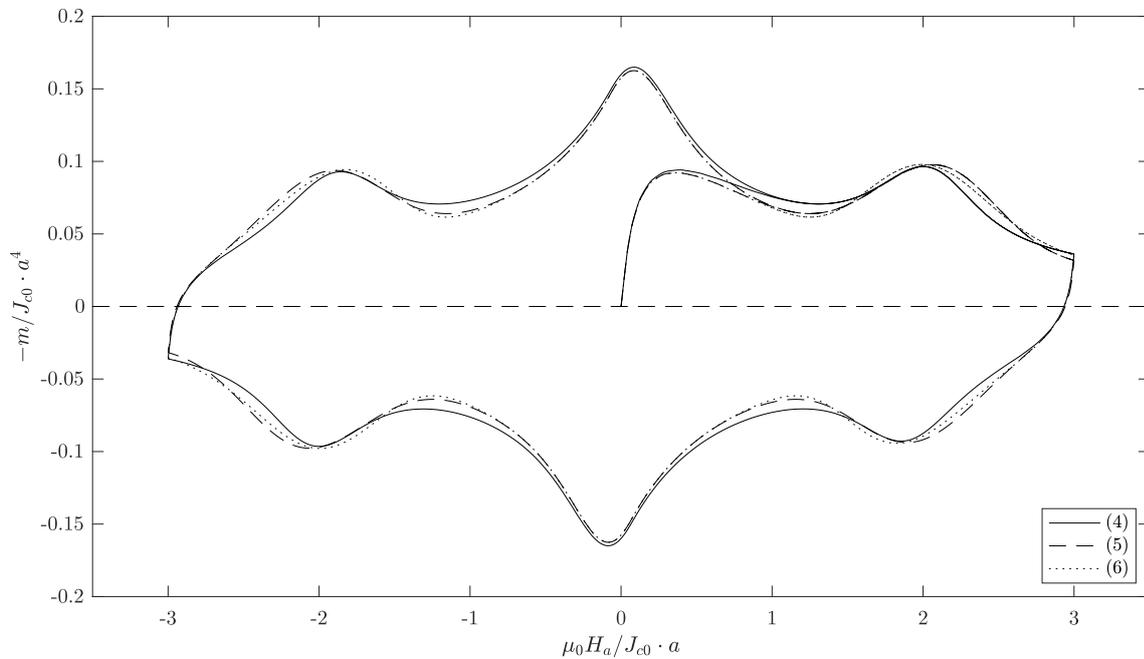


Рис. 2. Петли гистерезиса для намагниченности сферического образца в модели Кима для пик-функций (4)-(6) с параметрами $A = 0.3 J_{c0}$, $B_p = 2 J_{c0} \cdot a$, $B_w = 0.4 J_{c0} \cdot a$

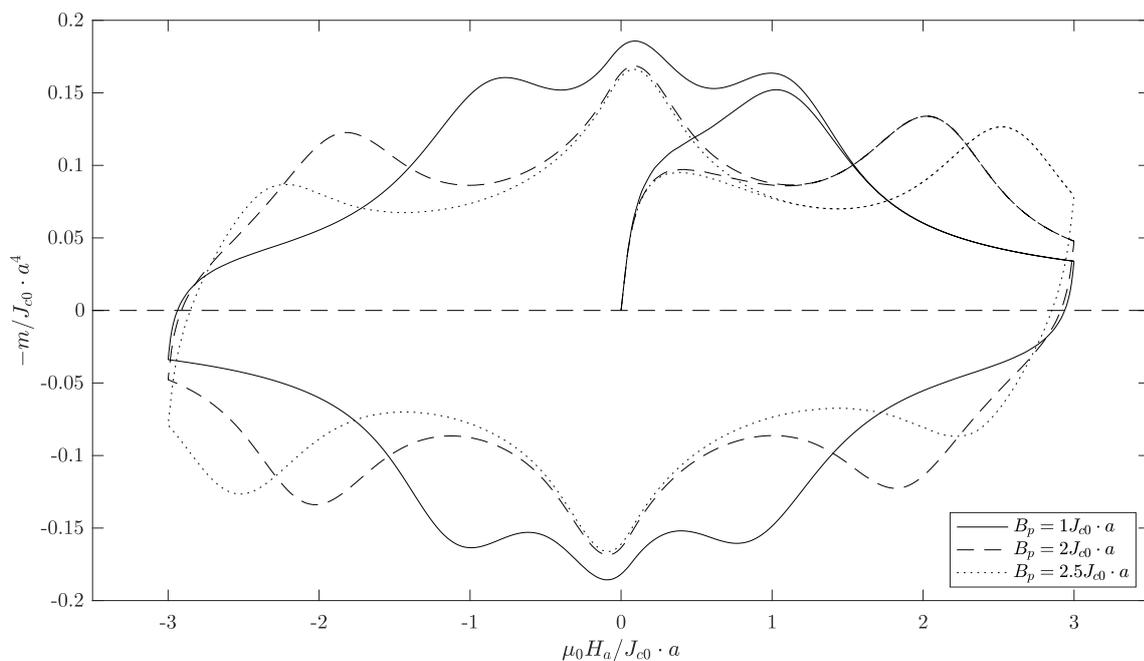


Рис. 3. Петли гистерезиса для намагниченности сферического образца в модели Кима для пик-функции (4) для различных положений максимума, $A = 0.5 J_{c0}$, $B_w = 0.5 J_{c0} \cdot a$

Таким образом в результате проведенных расчетов в работе получены петли гистерезиса намагниченности для цилиндрического и шарообразного образцов с использованием различных моделей пик-эффекта.

Литература

1. Gokhfeld D.M. Secondary Peak on Asymmetric Magnetization Loop of Type-II Superconductors. *J. Supercond. Novel Magn.* 2013. Vol. 26, No. 2. pp. 281-283.
2. Brandt E.H. Superconductor disks and cylinders in an axial magnetic field. I. Flux penetration and magnetization curves. *Phys. Rev. B.* 1998. Vol. 58, No. 10. pp. 6506-6522.
3. Кузьмичев Н.Д., Шушпанов А.А. Васютин М.А. Математическое моделирование магнитных свойств эллипсоидов вращения жёстких сверхпроводников второго рода в модели Бина. *Журнал Средневолжского математического общества.* 2019. Т. 21, № 3. С. 353 - 362.
4. Кузьмичев Н.Д., Шушпанов А.А. Васютин М.А. Математическое моделирование магнитных свойств осесимметричных сверхпроводников второго рода в модели Кима. *Журнал Средневолжского математического общества.* 2020. Т. 22, № 4. С. 456 - 462.

MSC2020 74F15

Mathematical modeling of the pic-effect of spheroid of hard superconductors

N. D. Kuzmichev, A. A. Shushpanov, M. A. Vasyutin, E. A. Lapshina
National Research Mordovia State University

УДК 519.6

Исследование устойчивости семейства двухслойных ПКРС с адаптивной вязкостью*

Ладонкина М. Е.^{1,2}, Повещенко Ю. А.^{1,2}, Ми Синь^{1,2}

ИПМ им. М. В. Келдыша РАН¹, МФТИ²

Настоящая работа посвящена исследованию устойчивости семейства двухслойных по времени полностью консервативных разностных схем (ПКРС) с профилированными по пространству временными весами для системы уравнений газовой динамики в переменных Эйлера с использованием адаптивной искусственной вязкости.

Отправной точкой для исследований служат работы [1–4]. Общий подход к исследованию двухслойных ПКРС в переменных Эйлера был предложен в [1], там были использованы изменяющиеся во времени и пространстве весовые множители, реализующие временную интерполяцию тех членов разностных уравнений, которые аппроксимируют пространственные производные. Главной целью является введение адаптивной вязкости с сохранением устойчивости схемы. В работе описывается первый этап: построение двухслойных ПКРС с адаптивной вязкостью и тестирование ПКРС на задаче Эйнфельда.

Для описания течения среды рассматривается система уравнений газовой динамики в эйлеровой системе координат:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{\mu} = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial \rho \vec{u}}{\partial t} + \operatorname{grad} P + \operatorname{div} (\vec{\mu} \cdot \vec{u}) = 0 \quad (2)$$

$$\frac{\partial \varepsilon \rho}{\partial t} + P \operatorname{div} \vec{u} + \operatorname{div} (\vec{\mu} \varepsilon) = 0, \quad (3)$$

где \vec{u} — скорость течения, ρ — плотность среды, $\vec{\mu} = \rho \cdot \vec{u}$ — плотность потока массы, ε — удельная внутренняя энергия. $E = \rho \varepsilon$ — внутренняя энергия. Система уравнений замыкается уравнением состояния идеального газа $P = (\gamma - 1)\varepsilon$.

На рис. 1 представлена разностная сетка, ω — узлы разностной сетки, Ω — ее ячейки.

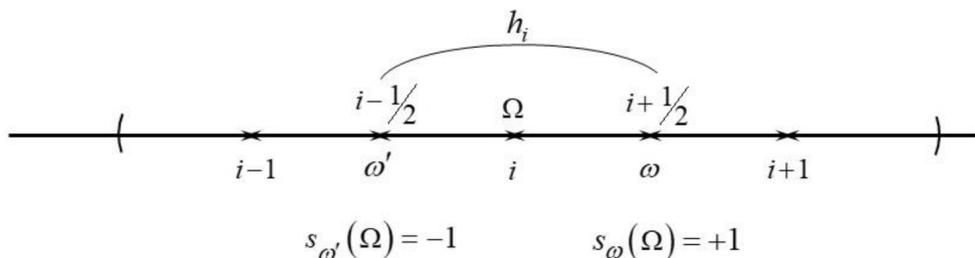


Рис. 1. Разностная схема

*Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, проект 20-01-00578, и China Scholarship Council

Термодинамические величины ε , ρ , P , массу ячейки $M = \rho V$ и ее объем V будем относить к ячейкам Ω с целыми индексами $(\varepsilon_i, \rho_i, P_i, M_i, V_i)$. Кинетические величины \vec{u} , \vec{I} приузловые объем ν и массу m будем относить к узлам ω с полуцелыми индексами $(u_{i+\frac{1}{2}}, I_{i+\frac{1}{2}}, \nu_{i+\frac{1}{2}}, m_{i+\frac{1}{2}})$. Для простоты изложения берем равномерную сетку с шагом h .

На временных слоях t и $\hat{t} = t + \tau$ ($\tau > 0$ — шаг по времени) введем разностные производные по времени и пространственно-точечные (т. е. в узлах сетки ω) временные интерполяции:

$$a_t = \frac{(\hat{a} - a)}{\tau}, \quad a^\sim \equiv a^{(\delta)} = \delta \hat{a} + (1 - \delta)a.$$

Выпишем полностью консервативные разностные схемы:

$$\frac{\hat{\rho}_i - \rho_i}{\tau} + \frac{\mu_{i+\frac{1}{2}}^\sim + \mu_{i-\frac{1}{2}}^\sim}{h} = 0, \quad (4)$$

$$\frac{\hat{I}_{i+\frac{1}{2}} - I_{i+\frac{1}{2}}}{\tau} + (P_{i+1}^\sim - P_i^\sim) + (\mu_{i+1}^\sim u_{i+1}^\sim - \mu_i^\sim u_i^\sim) = 0 \quad (5)$$

$$\frac{\hat{E}_i - E_i}{\tau} + P_i^\sim \frac{u_{i+\frac{1}{2}}^\sim - u_{i-\frac{1}{2}}^\sim}{h} + \frac{\mu_{E_{i+\frac{1}{2}}}^\sim - \mu_{E_{i-\frac{1}{2}}}^\sim}{h} = 0. \quad (6)$$

Введем адаптивные вязкости в массовом потоке, давлении, энергетическом потоке для уравнений массы, импульса и энергии соответственно:

$$\mu_{i+\frac{1}{2}} = u_{i+\frac{1}{2}}(\rho_i + \rho_{i+1}) - \left(\frac{\nu}{h}\right)_{i+\frac{1}{2}}(\rho_{i+1} - \rho_i), \quad (7)$$

$$P_i^\sim = [P_i - \left(\frac{\nu u}{h}\right)_i (u_{i+\frac{1}{2}} - u_{i-\frac{1}{2}})]^{(0.5)}, \quad (8)$$

$$\mu_{E_{i+\frac{1}{2}}} = u_{i+\frac{1}{2}} \frac{\rho_i + \rho_{i+1}}{2} - \left(\frac{\nu E}{h}\right)_{i+\frac{1}{2}}(E_{i+1} - E_i). \quad (9)$$

Для тестирования была выбрана задача Эйнфельда [5, 6] о распространении двух симметричных волн разрежения в противоположные стороны. Большой научный интерес представляет поведение внутренней энергии на численном решении. Задача решается как частный случай задачи Римана о распаде произвольного разрыва. В качестве расчетной области выбран отрезок $[-1, 1]$. Разрыв располагается в центре этого отрезка в точке $x = 0$. Начальные условия представлены в нижней таблице. В качестве системы единиц измерения в расчетах используется СИ.

Таблица 1

Левая область ($x < 0$)			Правая область ($x > 0$)		
ρ	u	p	ρ	u	p
1	-2	0.4	1	-2	0.4

Со временем в центре области образуется расширяющийся неподвижный участок (плато) с постоянными значениями плотности и давления газа, которые являются достаточно малыми. Т. к. уравнение состояния идеального газа выполняется, удельная внутренняя энергия остается константой на этом участке, энтропия также остается постоянной во всей расчетной области при $t > 0$ (изоэнтропический процесс). Численные решения этой задачи на основе многих известных методов передают поведение удельной внутренней энергии неудовлетворительно.

На графиках (рис. 2-6) приведены аналитические и численные решения для плотности, давления, энергии, скорости и температуры.

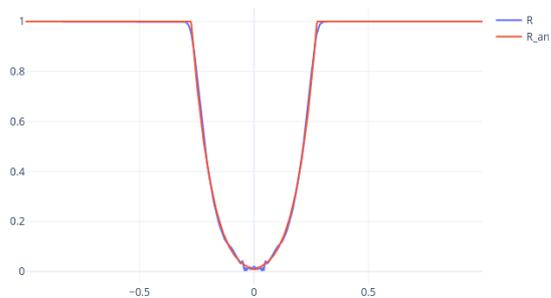


Рис. 2. Графики плотности

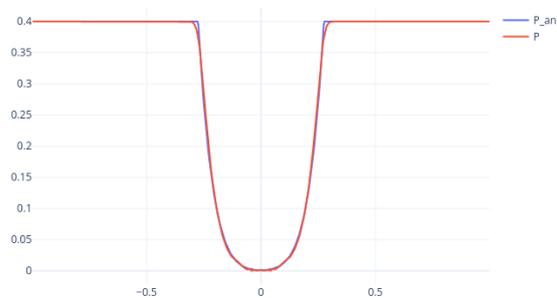


Рис. 3. Графики давления

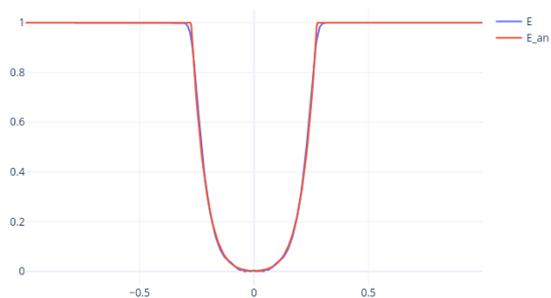


Рис. 4. Графики энергии

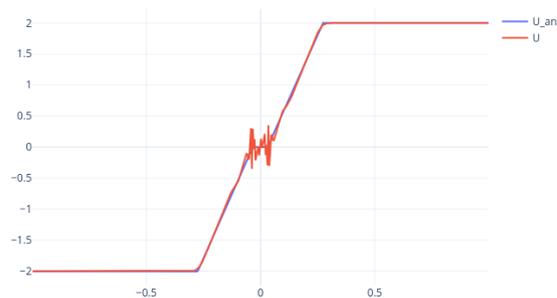


Рис. 5. Графики скорости

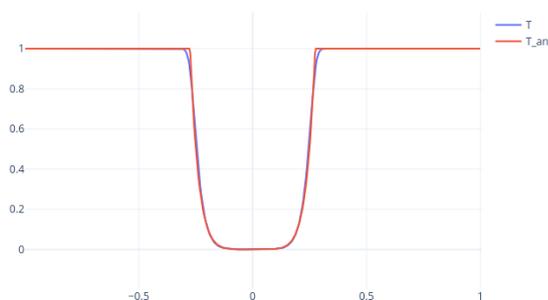


Рис. 6. Графики температуры

По сравнению с наиболее известными разностными методами, расчеты показали, что

предложенная выше схема существенно улучшает аппроксимацию термодинамических величин в задаче Эйнфельда. В то же время выбор адаптивной вязкости для устранения высокочастотных осцилляций в уравнении импульса требует дальнейших исследований.

Литература

1. Колдоба А. В., Повещенко Ю. А., Попов Ю. П. Двухслойные полностью консервативные разностные схемы для уравнений газовой динамики в переменных Эйлера // ЖВМиМФ. 1987. Т. 27, № 5. С. 779-784.
2. Колдоба А. В., Кузнецов О. А., Повещенко Ю. А., Попов Ю. П. Об одном подходе к расчету задач газовой динамики с переменной массой квазичастицы // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша АН СССР. 1985. № 57. 14 с.
3. Колдоба А. В., Повещенко Ю. А. Полностью консервативные разностные схемы для уравнения газовой динамики при наличии источников массы // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша АН СССР. 1982. № 160. 14 с.
4. Повещенко Ю. А., Ладонкина М. Е., Подрыга В. О., Рагимли О. Р., Шарова Ю. С. Об одной двухслойной полностью консервативной разностной схеме газовой динамики в эйлеровых переменных с адаптивной регуляризацией решения // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. 2019. № 14. 23 с.
5. Криксин Ю. А., Тишкин В. Ф. Численное решение задачи Эйнфельда на основе разрывного метода Галеркина // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2019. 090. 22 с.
6. Toro E.F. Riemann Solvers and Numerical Methods for Fluid Dynamics: A Practical Introduction. 2nd Edition, Springer, 1999. 645 p.

MSC2020 35Q31, 76N15

Study on the stability of two-layer completely conservative difference scheme family with adaptive viscosity

M. E. Ladonkina^{1,2}, Yu. A. Poveschenko^{1,2}, Mi Xin^{1,2}

Keldysh Institute of Applied Mathematics, Russian Academy of Sciences¹, MIPT²

УДК 519.63

Теоретический анализ полностью консервативных разностных схем с адаптивной вязкостью*

Ладонкина М. Е.^{1,2}, Повещенко Ю. А.^{1,2}, Рагимли О. Р.¹, Чжан Хаочэнь^{1,2}

ИПМ им. М. В. Келдыша РАН¹,
МФТИ²

Как показала практика, принцип полной консервативности [1] является одним из весьма эффективных критериев качества разностных схем, возникающих при численном моделировании движений сплошной среды. Проблема построения двухслойных по времени разностных схем, удовлетворяющих этому принципу, была решена в [2] для случая лагранжева описания движения среды. Определенные трудности возникли при попытке построить такие схемы для уравнений газовой динамики в эйлеровых переменных. В [3] было рассмотрено весьма широкое семейство двухслойных разностных схем и показано, что оно не содержит полностью консервативной разностной схемы. В работе [4] была построена трехслойная полностью консервативная схема. На случай пространственных течений она была обобщена в [5].

Настоящая работа является естественным продолжением [6-8] с использованием операторного подхода [9-11] и конструированием регуляризирующих потоков массы, импульса и внутренней энергии, не нарушающих свойств полной консервативности системы. В ней работа сил термодинамического сжатия связана с дивергентным сжатием вещества, интерполяция по времени скоростей движения которого использует технику профилирования временных весов по пространству.

Сами же интерполяционные веса связаны с переменными массами движущихся узловых частиц среды. Такая нелинейная аппроксимация скоростей частиц в узлах разностной сетки (зависящая от массы этих частиц) обеспечивает одновременно две вещи. Во-первых, она сохраняет внутреннюю энергию в данном типе дивергентных разностных схем, что обеспечивается отсутствием постоянно действующих аппроксимационных источников разностного происхождения в уравнении внутренней энергии, производящих «вычислительную» энтропию, в том числе на сингулярных особенностях решения (например, на расходящихся центрированных волнах разрежения). Во-вторых, эта аппроксимация для узловых частиц переменной массы обеспечивает одновременный согласованный баланс их импульса и кинетической энергии с учетом массоперетоков в движущейся среде. Наконец она является простой в реализации и имеет второй порядок аппроксимации.

Также в работе предложена естественная регуляризация потоков массы, импульса и внутренней энергии системы, не нарушающая свойств полной консервативности разностных схем данного класса. Исследована амплитуда этих потоков на явном и неявном слоях по времени, а также допустимость их адаптивного использования на сетках переменной структуры. Адаптивное включение искусственной вязкости может производиться следуя, например, [12], но не для схемы Лакса-Вендрофа, а для данного класса двухслойных по времени ПКРС.

В данной работе проведен теоретический анализ с разработанным применительно к полностью консервативным разностным схемам с профилированными по пространству временными весами, связанными с переменными массами движущихся узловых частиц среды

*Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, проект 20-01-00578

классом дивергентных адаптивных вязкостей. Для уравнений газовой динамики в эйлеровых переменных с использованием операторного подхода и конструированием регуляризирующих потоков массы, импульса и внутренней энергии, не нарушающих свойств полной консервативности, построено семейство двухслойных по времени полностью консервативных разностных схем с профилированными по пространству временными весами, связанными с переменными массами движущихся узловых частиц среды. Значительное внимание в работе уделено способам конструирования регуляризованных потоков массы, импульса и внутренней энергии, не нарушающих свойств полной консервативности разностных схем данного класса, анализу их амплитуды и возможности их использования на неравномерных сетках. Разработанные схемы могут быть использованы для расчета процессов в неравновесных по температуре средах, например, при необходимости учета электрон-ионной релаксации температуры в короткоживущей плазме в условиях интенсивного энерговысвобождения. Предложенный алгоритм показал существенное улучшение качества численного решения задачи Эйнфельда. Эффективное сохранение баланса внутренней энергии в данном типе дивергентных разностных схем обеспечивается отсутствием постоянно действующих источников разностного происхождения, производящих «вычислительную» энтропию (в том числе на сингулярных особенностях решения).

Литература

1. Самарский А.А., Попов Ю.П. Разностные методы решения задач газовой динамики. Москва, наука, 1980.
2. Попов Ю.П., Самарский А.А. Полностью консервативные разностные схемы // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 1969. Т. 9, № 4. С. 953-958.
3. Кузьмин А.В., Макаров В.Л. Об одном алгоритме построения полностью консервативных разностных схем // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 1982. Т. 22, № 1. С. 123-132.
4. Кузьмин А.В., Макаров В.Л., Меладзе Г.В. Об одной полностью консервативной разностной схеме для уравнения газовой динамики в переменных эйлера // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 1980. Т. 20, № 1. С. 171-181.
5. Головизнин В.М., Краюшкин И.В., Рязанов М.А., Самарский А.А. Двумерные полностью консервативные разностные схемы газовой динамики с разнесенными скоростями // Препринты ИПМ им М.В. Келдыша АН СССР. 1983. № 105.
6. Колдоба А.В., Повещенко Ю.А., Попов Ю.П. Двухслойные полностью консервативные разностные схемы для уравнений газовой динамики в переменных Эйлера // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 1987. Т. 27, № 5. С. 779-784.
7. Колдоба А.В., Кузнецов О.А., Повещенко Ю.А., Попов Ю.П. Об одном подходе к расчету задач газовой динамики с переменной массой квазичастицы // Препринты ИПМ им М.В. Келдыша АН СССР. 1985. № 57.
8. Колдоба А.В., Повещенко Ю.А. Полностью консервативные разностные схемы для уравнений газовой динамики при наличии источников массы // Препринты ИПМ им М.В. Келдыша АН СССР. 1982. № 160.
9. Самарский А.А., Колдобав А.В., Повещенко Ю.А., Тишкин В.Ф., Фаворский А.П. Разностные схемы на нерегулярных сетках. Минск: ЗАО «Критерий». 1996.

10. Колдоба А.В, Повещенко Ю.А, Гасилова И.В, Дорофеева Е.Ю. Разностные схемы метода опорных операторов для уравнений теорий упругости // Математическое моделирование. 2012. Т. 24, № 12. С. 86-96.
11. Повещенко Ю.А., Подрыга В.О., Шарова Ю.С. Интегрально-согласованные методы расчета самогравитирующих и магнитогидродинамических явлений // Препринты ИПМ им М.В. Келдыша РАН. 2018. № 160.
12. Попов Ю.В., Фрязинов И.В. Метод адаптивной искусственной вязкости численного решения уравнений газовой динамики. Москва: Красанд. 2014.

MSC2020 76N15, 65M06

Theoretical Analysis of Fully Conservative Difference Schemes with Adaptive Viscosity

M. E. Ladonkina^{1,2}, Yu. A. Poveshenko^{1,2}, O. R. Ragimli¹, H. Zhang^{1,2}
Keldysh Institute of Applied Mathematics¹,
MIPT²

УДК 534.11

Математическое моделирование нелинейных колебаний стержня переменной длины

Литвинов В. Л.¹, Литвинова К. В.²

филиал ФГБОУ ВО "СамГТУ" в г. Сызрани¹,
Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова²

Среди всего множества проблем динамики упругих систем с точки зрения технических приложений весьма актуальны задачи о колебаниях в системах с изменяющимися во времени геометрическими размерами. Исследования многих авторов по динамике подъемных канатов привели к необходимости постановки новых задач механики, касающихся динамики одномерных объектов переменных длин [1–4]. В математической формулировке это сводится к новым задачам математической физики – к исследованию соответствующих уравнений гиперболического типа в переменных областях изменения обоих аргументов [6].

До настоящего времени не существует общего подхода к формулировке таких задач, и авторы в каждом конкретном случае приспособливают существующие методы к решению рассматриваемого вопроса [1–9]. Отметим при этом, что и способы решения этих уравнений в переменных геометрических областях качественно отличны от классических способов математической физики. Например, для колебаний струн переменных длин теряют привычный смысл понятия собственных частот и фаз, т. е. собственных чисел и собственных функций, так как частоты колебаний струны переменной длины будут некоторыми функциями времени. Теряется независимость отдельных тонов колебаний. Другими словами, изучаемый динамический процесс эволюционирует во времени.

Эффективность выделения собственных движений (тонов колебаний), очевидно, зависит от отношения скорости изменения длины объекта к скорости распространения в нем упругой волны. При скорости изменения длины, соизмеримой со скоростью распространения волны в упругом объекте, будет иметь место быстропротекающий неустановившийся динамический процесс [5].

В большинстве технических приложений, имеющих дело с упругими объектами переменной длины, как правило, отношение скорости изменения длины к скорости упругой волны в нем мало. Например, в шахтных подъемниках скорость подъема лежит в пределах 10–20 м/с, а скорость упругой волны в стальном канате составляет около 4200 м/с. Даже в задачах о вытягивании стального каната баллистическим телом это отношение скоростей обычно не превышает 0,1 и может считаться малым [5]. Эти факты дают возможность использовать при построении теории движения объектов переменной длины обобщения фундаментальных классических понятий «собственных чисел» и «собственных частот».

При постановке задач для рассматриваемого класса систем наиболее трудным является корректная формулировка краевых условий на движущихся границах. В работе рассмотрен новый частный случай задачи о продольно – поперечных колебаниях стержня с движущейся границей, один конец которого закреплен, а второй свободен. На основе вариационных принципов механики выведены уравнения движения вместе с соответствующими краевыми условиями, учитывающие геометрическую нелинейность, изгибную жесткость, взаимодействие продольных и поперечных колебаний, вязкоупругость, сопротивление среды. Проведена линеаризация указанной модели и установлено, что полученная модель совпадает с классической в частном случае малых колебаний. Таким образом, соблюдается принцип однородности, а полученная математическая модель позволяет описывать колебания большой

интенсивности стержня с движущейся границей.

Литература

1. Савин Г.Н., Горошко О.А. Динамика нити переменной длины // Киев: Наук. думка. 1962. 332 с.
2. Самарин Ю.П. Об одной нелинейной задаче для волнового уравнения в одномерном пространстве // Прикладная математика и механика. 1964. Т. 26, вып. 3. С. 77–80.
3. Весницкий А.И. Волны в системах с движущимися границами и нагрузками // М.: Физматлит. 2001. 320 с.
4. Лежнева А.А. Изгибные колебания балки переменной длины // Изв. АН СССР. Механика твердого тела. 1970. № 1. С. 159–161.
5. Литвинов В.Л. Продольные колебания каната переменной длины с грузом на конце // Вестник научно-технического развития. 2016. № 1 (101). С. 19–24.
6. Литвинов В.Л. Решение краевых задач с движущимися границами при помощи приближенного метода построения решений интегро-дифференциальных уравнений // Тр. Ин-та математики и механики УрО РАН. 2020. Т. 26, № 2. С. 188-199.
7. Анисимов В.Н., Литвинов В.Л. Математические модели продольно-поперечных колебаний объектов с движущимися границами // Вестн. Сам. гос. техн. ун-та. Сер. Физ.-мат. Науки, 2015. Т. 19, № 2. С. 382-397.
8. Анисимов В.Н., Литвинов В.Л. Математическое моделирование и исследование резонансных свойств механических объектов с изменяющейся границей: монография / В. Л. Литвинов, В. Н. Анисимов – Самара: Самар. гос. техн. ун-т, 2020. – 100 с.
9. Литвинов В.Л., Анисимов В.Н. Применение метода Канторовича–Галеркина для решения краевых задач с условиями на движущихся границах // Известия Российской академии наук. Механика твердого тела. 2018. № 2. С. 70–77.

MSC2020 74H45, 74K05

Mathematical modeling of nonlinear vibrations of a rod of variable length

V. L. Litvinov¹, K. V. Litvinova²

Syzran' Branch of Samara State Technical University¹,
Lomonosov Moscow State University²

УДК 519.6

Применение теории связанных волноводов для моделирования переключателей для CNOT вентилей

Лытаев А. А., Попов И. Ю.

Университет ИТМО

Создание квантового компьютера является важной задачей, успешное решение которой позволит решать большое количество вычислительных задач с существенным ускорением, по сравнению с существующими на сегодняшний день методами. Основной проблемой, возникающей при попытке создать рабочий прототип данного устройства является быстрая декогеренция, которая препятствует проведению операций над квантовыми битами и измерению их состояний. Одним из способов решения этой проблемы является оптическая модель квантовых вычислений, преимущество которой заключено в низкой эффективности взаимодействия между фотонами. Недостатком существующих линейно-оптических моделей является вероятностная природа работы двухкубитных вентилей [1, 2]. Недостатком существующих оптических моделей на базе нелинейных оптических эффектов является слабость нелинейного оптического взаимодействия и, как следствие, необходимость в использовании длинных оптических путей, что приводит к большим вычислительным ошибкам [3].

Один из методов реализации нелинейно-оптической модели вычислений приведён в статье [4], где в качестве квантового бита используется волновод, поддерживающий распространение двух направленных поперечных мод одной поляризации: TE_0 мода представляет состояние $|0\rangle$, TE_1 мода представляет состояние $|1\rangle$. Преимуществом такой модели является увеличение эффективности нелинейного взаимодействия за счёт большей плотности оптического излучения. В этой же статье приводится возможная схема реализации CNOT вентилей на основе нелинейных эффектов в плечах волноводного интерферометра.

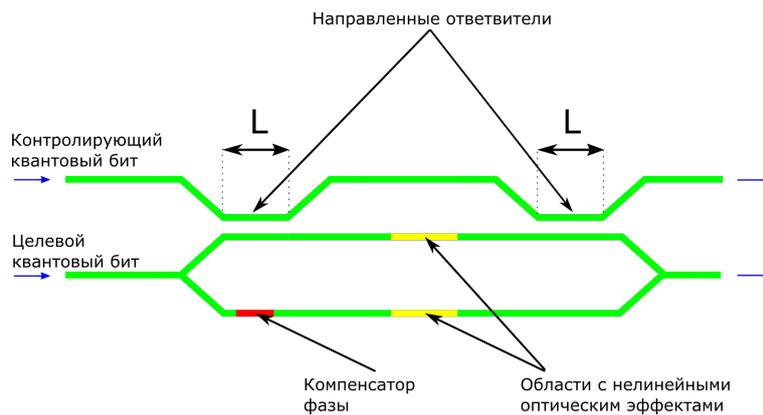


Рис. 1. Схема CNOT вентилей

Принцип, на основе которого работает данный вентиль, заключается в том, что чем ближе состояние контролирующего волновода к $|1\rangle$, тем большая часть излучения будет передана из него в верхнее плечо интерферометра и тем больше будет фазовый сдвиг, которому подвергается состояние целевого квантового бита. При этом $|0\rangle$ компонента состояния квантового бита в контролирующем волноводе остаётся в контролирующем волноводе. Для корректного осуществления описанной операции требуется оптимальный подбор парамет-

ров сближения волноводов – длины сближения L и расстояния между волноводами R , что является главной целью проведенного исследования.

Математическая модель рассматриваемой системы построена на основании теории связанных волноводов [5], примененной к системе из двух плоских оптических волноводов. Электромагнитное поле в системе рассматривается как сумма полей отдельных волноводов с амплитудными коэффициентами.

$$\begin{cases} \vec{E} = \sum_{\nu, m = 0, 1} A_{\nu m}(z) \vec{E}_{\nu m}, \\ \vec{H} = \sum_{\nu, m = 0, 1} A_{\nu m}(z) \vec{H}_{\nu m}. \end{cases} \quad (1)$$

Подстановка данного разложения в систему уравнений Максвелла приводит к системе

$$\begin{cases} \sum_{\nu, m = 0, 1} \frac{\partial A_{\nu m}}{\partial z} (\vec{e}_z \times \vec{H}_{\nu m}) - i\omega \varepsilon_0 (n_{core}^2 - n_{clad}^2)_{\nu} A_{\nu m} \vec{E}_{\nu m} = 0, \\ \sum_{\nu, m = 0, 1} \frac{\partial A_{\nu m}}{\partial z} (\vec{e}_z \times \vec{E}_{\nu m}) = 0. \end{cases} \quad (2)$$

Интегрирование системы и проведение асимптотического анализа с пренебрежением членами высоких порядков малости приводит к системе

$$\begin{cases} \frac{\partial A_{00}}{\partial z} c_0 + A_{10} i D_0^0 + A_{11} i D_1^0 e^{i\Delta\beta z} = 0 \\ \frac{\partial A_{01}}{\partial z} c_1 + A_{10} i D_0^1 e^{-i\Delta\beta z} + A_{11} i D_1^1 = 0 \\ \frac{\partial A_{10}}{\partial z} c_0 + A_{00} i D_0^0 + A_{01} i D_1^0 e^{i\Delta\beta z} = 0 \\ \frac{\partial A_{11}}{\partial z} c_1 + A_{00} i D_0^1 e^{-i\Delta\beta z} + A_{01} i D_1^1 = 0 \end{cases} \quad (3)$$

Дополнительное пренебрежение достаточно малыми членами, содержащими экспоненту $e^{i\Delta\beta z}$ позволяет получить точное решение системы в виде

$$\begin{aligned} A_{0m}(z) &= A_{0m}(0) \cos\left(\frac{D_m^m}{c_m} z\right) - i A_{1m}(0) \sin\left(\frac{D_m^m}{c_m} z\right), \\ A_{1m}(z) &= A_{1m}(0) \cos\left(\frac{D_m^m}{c_m} z\right) - i A_{0m}(0) \sin\left(\frac{D_m^m}{c_m} z\right). \end{aligned} \quad (4)$$

Система, описываемая подобной приближенной моделью, будет выполнять функцию переключателя в том случае, если удовлетворяется целочисленное условие

$$\frac{D_1^1/c_1}{D_0^0/c_0} = \frac{4i_1 + 1}{4i_0}, \quad i_0, i_1 \in \mathbb{N}. \quad (5)$$

Для подбора таких параметров был реализован алгоритм, который перебирает значения L и R , при которых выполняется условие (5), при этом среди них выбирается такая пара, в которой L будет наименьшим, что позволяет уменьшить размер переключателя и возможную вычислительную ошибку из-за неровностей на стенках волновода.

Система (3) не имеет аналитического решения, однако, это решение может быть найдено численно. Для этого был применён метод конечных разностей с использованием явной вычислительной схемы. Полученное численное решение позволяет оценить влияние взаимодействия между модами различных порядков на поведение системы.

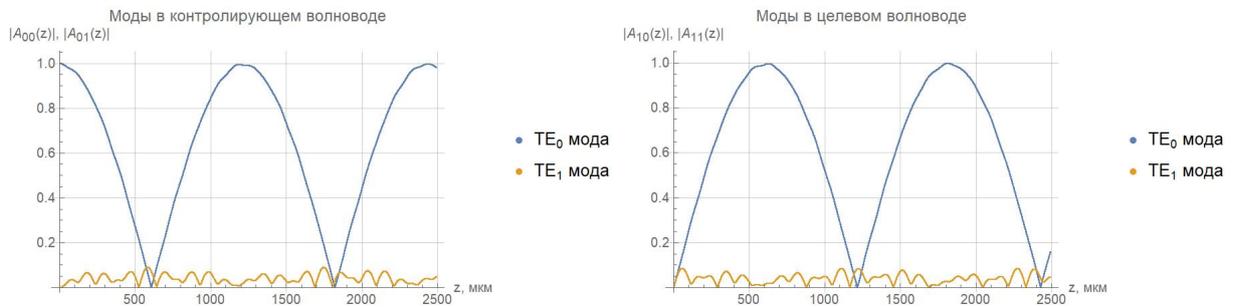


Рис. 2. Распространение излучения в системе при $|0\rangle$ в контролирующем волноводе

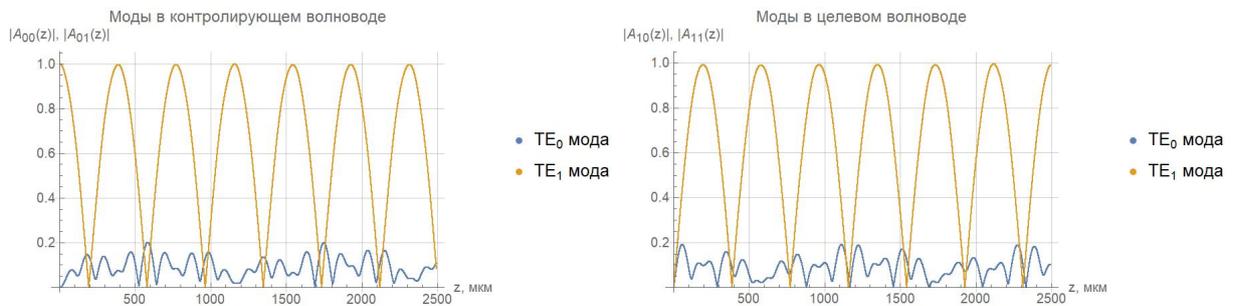


Рис. 3. Распространение излучения в системе при $|1\rangle$ в контролирующем волноводе

Анализ полученных результатов позволяет утверждать, что ошибка, возникающая в квантовом CNOT вентиле, работающем на описанном выше принципе, вследствие взаимодействия между модами различных порядков не превышает 1%.

Литература

1. Knill E., Laamme R., Milburn G. A scheme for efficient quantum computation with linear optics // Nature. 2001. Vol. 409. pp. 46-52.
2. Gavrilov M. Quantum computer elements based on coupled quantum waveguides // Phys. Part. Nuclei Lett. 2007. Vol. 4. pp. 137-140.
3. Milburn G.J. Quantum optical Fredkin gate // Phys. Rev. Lett. 1989. Vol. 62. pp. 2124.
4. Fu J., Shao-Fang T. Quantum Computations with Transverse Modes of an Optical Field Propagating in Waveguides // Chinese Phys. Lett. 2003. Vol. 20, No. 9. pp. 1426.
5. Маркузе Д. Оптические волноводы. М.: Мир. 1974.

MSC2020 78M35 78M20

Application of the coupled mode theory for simulation of switchers for CNOT gates

A. A. Lytaev, I. Yu. Popov

ITMO University

УДК 519.63

Математическое моделирование нестационарного течения однофазного потока в пористых коллекторах*

Мазитов А. А.¹, Губайдуллин И. М.^{1,2}

Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН¹,
Уфимский государственный нефтяной технический университет²

Добыча нефти сопровождается выделением сопутствующих воды или газа из нефти как в поверхностных, так и в пластовых условиях. Различие давлений в пласте и на поверхности приводит к тому, что часть газа, растворенного в сырой нефти, при подъеме в стволе скважины переходит в свободное состояние [1]. Таким образом, происходит перемешивание нефти, пластовой воды и нефтяного газа с образованием многофазных потоков. В таких потоках концентрация компонентов смеси изменяется во времени и зависит от различных факторов, что в свою очередь приводит к нестабильности структуры течения потока и изменению его физических свойств. Отсюда можно сделать вывод, что характеристики нефтегазоводяной смеси являются случайными временными функциями.

Требования нефтяной промышленности в настоящее время обуславливают потребность в количественных и качественных методах исследования многофазных потоков. Полученные результаты оценки технологических параметров могут быть использованы при проектировании конструкций.

Целью работы является разработка математической модели, которая наиболее полно описывает процесс теплопереноса жидкости в случае многокомпонентного потока. Изучение задачи проведено поэтапно.

На первом этапе рассмотрена однофазная жидкость, течение которой описывается системой дифференциальных уравнений в частных производных:

$$\begin{cases} \phi c \frac{\partial P}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{k}{\mu} r \frac{\partial P}{\partial r} \right), \\ c_p \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial r} \right) - c_p u \left(\frac{\partial T}{\partial r} + \epsilon \frac{\partial P}{\partial r} \right) + \eta \phi c_p \frac{\partial P}{\partial t}. \end{cases}$$

Здесь ϕ – пористость (д. ед.), c – сжимаемость (1/Па), k – проницаемость (м²), μ – вязкость (Па·с), P – пластовое давление (МПа), r – радиус (м), t – время (сут), λ – теплопроводность пористой среды [Вт/(м³·К)], c_p – теплоемкость жидкости [Дж/(м³·К)], T – температура (К), u – скорость конвективного переноса тепла в пористой среде [м/с], ϵ – коэффициент Джоуля-Томсона [К/Па], η – коэффициент адиабатического расширения [К/Па].

Первое уравнение описывает процесс изменения давления в пласте. Второе – процесс теплопереноса жидкости. Начальным шагом к решению представленной системы уравнений является его преобразование в систему линейных алгебраических уравнений путем получения дискретных аналогов исходных уравнений. Для этого использован метод контрольных объемов, заключающийся в разбиении расчетной области на некоторое число контрольных объемов, в каждом из которых содержится одна узловая точка [2]. Дифференциальные уравнения интегрируются по каждому контрольному объему, для вычисления интегралов

*Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ (проект № 20-37-90080)

используются кусочные профили. Методом контрольных объемов для представленной системы получены дискретные аналоги в виде системы линейных алгебраических уравнений:

$$\begin{aligned} a_P P_P^1 &= a_e [f P_E^1 + (1-f) P_E^0] + a_w [f P_W^1 + (1-f) P_W^0] + P_P^0 [a_P^0 - (1-f) a_e - (1-f) a_w], \\ b_P T_P^1 &= b_e [f T_E^1 + (1-f) T_E^0] + b_w [f T_W^1 + (1-f) T_W^0] + \\ &+ T_P^0 [b_P^0 - (1-f) b_e - (1-f) b_w + k_1] + (k_3 - k_2) (P_P^1 - P_P^0). \end{aligned}$$

Для определенных конкретных значений весового коэффициента f дискретный аналог приводится к схемам для параболических дифференциальных уравнений. В частности при $f = 0$ получаем явную схему, а при $f = 1$ – неявную. Дальнейшее решение задачи сводится к решению системы линейных уравнений путем приведения к неявной разностной схеме, которая сводится к трехточечному уравнению. Одним из известных и общепринятых методов решений таких уравнений является метод прогонки.

Полученная математическая модель позволит количественно описывать поведение температуры и давления в нефтяных коллекторах. Разработанный алгоритм и программа являются удобным и легко адаптируемым к потребностям практики инструментарием для расчета сложных процессов, возникающих при разработке пористых коллекторов.

Литература

1. Басниев К. С., Дмитриев Н. М., Розенберг Г. Д. Нефтегазовая гидромеханика: Учебник для вузов. Москва-Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2003. 480 с.
2. Патанкар С., Численные методы решения задач теплообмена и динамики жидкости. М: Энергоатомиздат, 1984. 152 с.

MSC2020 35R01

Mathematical modeling of unsteady single-phase flow in porous reservoirs

A. A. Mazitov¹, I. M. Gubaydullin^{1,2}

Institute of Petrochemistry and Catalysis of the Russian Academy of Sciences¹,
Ufa State Petroleum Technological University²

УДК 004.021

Моделирование реакции сернокислотного алкилирования изобутанов олефинами методом роя частиц и генетическим алгоритмом *

Махмутова Д. Ф.¹, Еникеева Л. В.^{1,2}

Уфимский государственный нефтяной технический университет¹,
Новосибирский государственный университет²

В последнее время интенсивно развиваются алгоритмы поисковой оптимизации. Среди них наибольшую популярность набирают популяционные алгоритмы. Их эффективность часто превосходит эволюционные алгоритмы. Значительное внимание в докладе уделяется методу роя частиц и генетическому алгоритму.

Однако, для того, чтобы применять методы теории оптимизации к практическим задачам, прежде всего, необходимо построить математическую модель задачи.

Математическое моделирование – это изучение поведения объекта в тех или иных условиях путем решения уравнений и его математической модели [1]. В данной работе будет проводиться математическое моделирование химического процесса, а именно – процесса алкилирования изопарафинов олефинами, основной целью которого является получение высокооктановых добавок к бензинам.

Под роевой оптимизацией понимается класс алгоритмов, направленных на решение сложных оптимизационных задач (дискретная оптимизация, многомерная оптимизация и многокритериальная оптимизация), работа которых основана на моделировании коллективного поведения различных колоний живых организмов. Отличительной особенностью таких моделей является то, что каждый отдельный организм в этой модели выполняет очень простые действия, подчиненные своей локальной цели, взаимодействуя с ограниченным числом других организмов в рассматриваемой колонии [2].

Генетический алгоритм (ГА) представляет собой эвристический алгоритм оптимизации, в основу которого положены биологические принципы естественного отбора и изменчивости. Для работы ГА выбирают множество натуральных параметров оптимизационной проблемы и кодируют их в последовательность конечной длины в некотором алфавите. Они работают до выполнения одного из условий: 1) выполнено заданное число итераций алгоритма; 2) на некоторой генерации будет получено решение определенного качества; 3) найден локальный оптимум, т. е. возникла преждевременная сходимость и алгоритм не может найти выход из этого состояния [3].

В данной работе поиск параметров осуществляется с использованием описанных алгоритмов. Получены графики, отражающие результаты численного моделирования реакции сернокислотного алкилирования изобутанов олефинами.

Литература

1. Царева З. М., Орлова Е. А. Теоретические основы химической технологии. Киев: Высшая школа, 1986. 271 с.

*Работа выполнена при частичной финансовой поддержке гранта РФФИ проект №19-37-60014

2. J. Kennedy, R. C. Eberhart. Particle swarm optimization, Proceedings of IEEE International Conference on Neural Networks, Piscataway, NJ, 1995. pp. 1942–1948.
3. Beyer H.-G., Schwefel H.-P., Wegener I. How to analyse Evolutionary Algorithms. Technical Report No. CI-139/02. University of Dortmund, Germany, 2002.

MSC2020 68W50

Modeling the reaction of sulfuric acid alkylation of isobutanes with olefins by the particle swarm method and genetic algorithm

D. F. Makhmutova¹, L. V. Enikeeva^{1,2}

Ufa State Petroleum Technological University¹,
Novosibirsk State University²

УДК 532.5:536.4:517.9

Математическое моделирование закрученной струи в приложениях к малоэмиссионному сжиганию низкосортных топлив*

Мизхер У. Д., Ковальногов В. Н., Вельмисов П. А.

Ульяновский государственный технический университет

В России, как и в большинстве стран мира, в настоящее время одной из целей государственной политики является снижение уровня угроз, негативно влияющих на атмосферный воздух в населенных пунктах [1]. Поэтому на законодательном уровне установлены низкие уровни предельно допустимых концентраций (ПДК) загрязняющих веществ в воздухе: оксидов азота, оксидов серы, летучей золы, бенз(а)пирена и т. д. Одним из основных источников загрязнения атмосферного воздуха является энергетика, а именно уходящие дымовые газы энергетических котлов ТЭС. Согласно [2] устойчивую позицию потребности в органическом топливе ЕЭС России занимает именно газ, имеющий ряд преимуществ перед другими видами органического топлива, в т. ч. и экологического характера.

Одним из перспективных и экологичных методов сжигания природного газа является его комбинированное сжигание с биогазом. Основной особенностью биогаза как топлива, является пониженное по сравнению с природным газом содержание метана и наличие диоксида углерода в больших количествах, что влияет на скорость распространения пламени и понижает теплоту сгорания биогаза. В работе [3] Институтом газа НАН Украины в лабораторных условиях оценены перспективы данного метода и сделан вывод о том, что биогаз является одним из экологически безопасных видов топлива.

Для моделирования процесса горения закрученного топливно-воздушного потока в данной работе используются уравнения неразрывности, Навье-Стокса, энергии [4–6].

$$\begin{aligned} \operatorname{div}(\rho \vec{V}) &= 0 \\ \operatorname{div}(\rho u \vec{V}) &= -\frac{\partial p}{\partial x} + \operatorname{div}(\mu \operatorname{grad} u) + \left(\frac{\partial(\overline{\rho u^2})}{\partial x} + \frac{\partial(\overline{\rho u'v'})}{\partial y} + \frac{\partial(\overline{\rho u'w'})}{\partial z} \right) \\ \operatorname{div}(\rho v \vec{V}) &= -\frac{\partial p}{\partial y} + \operatorname{div}(\mu \operatorname{grad} v) + \left(\frac{\partial(\overline{\rho u'v'})}{\partial x} + \frac{\partial(\overline{\rho v^2})}{\partial y} + \frac{\partial(\overline{\rho v'w'})}{\partial z} \right) \\ \operatorname{div}(\rho w \vec{V}) &= -\frac{\partial p}{\partial z} + \operatorname{div}(\mu \operatorname{grad} w) + \left(\frac{\partial(\overline{\rho u'v'})}{\partial x} + \frac{\partial(\overline{\rho v'w'})}{\partial y} + \frac{\partial(\overline{\rho w^2})}{\partial z} \right) \\ \rho c_p \left[u \frac{\partial T}{\partial x} + v \frac{\partial T}{\partial y} + w \frac{\partial T}{\partial z} \right] &= \operatorname{div} \left[\left(\lambda + \frac{c_p \mu_t}{Pr_t} \right) \operatorname{grad} T \right] + S_h. \end{aligned}$$

Здесь u, v, w – компоненты скорости по оси (x, y, z) последовательно, p – давление, ρ – плотность, $(-\overline{\rho u^2}, -\overline{\rho v^2}, -\overline{\rho w^2}, -\overline{\rho u'v'}, -\overline{\rho u'w'}, -\overline{\rho v'w'})$ – напряжения Рейнольдса, μ – динамическая вязкость, μ_t – турбулентная вязкость, T – температура, c_p – удельная теплоемкость, λ – теплопроводность, Pr_t – турбулентное число Прандтля, S_h включает теплоту химической реакции и любые другие объемные источники тепла, \vec{V} – вектор скорости:

*Работа выполнена при финансовой поддержке грантом РФФИ и Ульяновской области (проекты № 18-41-730015), грантом Президента РФ (проект НШ-2493.2020.8)

$$\vec{V} = u\vec{i} + v\vec{j} + w\vec{k}$$

Уравнения модели турбулентности k - ϵ для описания процесса горения для стационарного потока примут согласно [4] вид

$$\text{div}(\rho k \vec{V}) = \text{div} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \text{grad } k \right] + G_k + G_b - \rho \epsilon - Y_M + S_k,$$

$$\text{div}(\rho \epsilon \vec{V}) = \text{div} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon} \right) \text{grad } \epsilon \right] + \rho C_1 S_\epsilon - \rho C_2 \frac{\epsilon^2}{k + \sqrt{\nu \epsilon}} + C_{1\epsilon} \frac{\epsilon}{k} C_{3\epsilon} G_b + S_\epsilon,$$

где

$$C_1 = \max \left[0.43, \frac{\eta}{\eta + 5} \right], \quad C_{3\epsilon} = \tanh \left| \frac{v}{u} \right|, \quad \eta = S \frac{k}{\epsilon}.$$

Постоянные модели $C_{1\epsilon}$, C_2 , σ_k и σ_ϵ имеют по умолчанию следующие значения [4]: $C_{1\epsilon} = 1,44$, $C_2 = 1,9$, $\sigma_k = 1$, $\sigma_\epsilon = 1,2$, k – кинетическая энергия турбулентности, ϵ – скорость диссипации, G_k – источник за счёт градиента средней скорости, G_b – источник за счёт архимедовых сил (важно для конвективных течений), Y_M – представляет собой вклад флуктуирующей дилатации в сжимаемой турбулентности в общую скорость диссипации, C_2 и $C_{1\epsilon}$ – постоянные, σ_k и σ_ϵ – турбулентные числа Прандтля для k и ϵ , соответственно, S_ϵ , S_k – определяемые пользователем источники, S – тензор средней скорости деформации, $\nu = \frac{\mu}{\rho}$ – кинематическая вязкость, $\mu_t = \rho C_\mu \frac{k^2}{\epsilon}$ – турбулентная вязкость ($C_\mu = 0,09$).

Камера сгорания представляет собой цилиндр с заданной постоянной температурой стенки $T_c = 617$ К и обладает следующими геометрическими характеристиками: $L = 7,3$ м; $D = 4$ м.

Камера сгорания (рис. 1) имеет одну комбинированную горелку, позволяющую обеспечить одновременное сжигание, как природного газа, так и биогаза. Горелочное устройство с центральной подачей газа содержит канал для подвода природного газа $S_{ch4} = 0,00125$ м², канал для подвода биогаза $S_{biogas} = 0,078$ м² и канал для подвода воздуха $S_{air} = 0,234$ м².

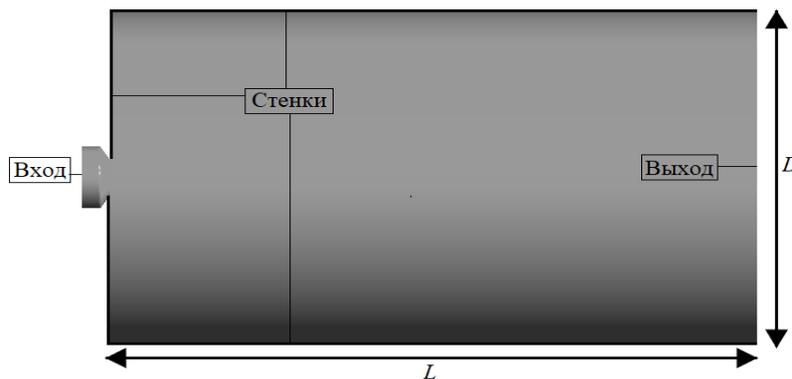


Рис. 1. Схема камеры сгорания

В ходе исследования моделировалось как совместное горение смеси природного газа и биогаза, так и раздельное горение топлив. На рис. 2 представлен результат горения комбинаций топлив с закруткой воздуха $\omega = 300$ рад/с, температурой воздуха на входе в горелочное устройство $T_{air} = 583$ К. Моделируемый расход топлив через горелку при совместном сжигании природного газа $\dot{m}_{ch4} = 0,2$ кг/с, биогаза $\dot{m}_{biogas} = 0,3$ кг/с. Моделируемый расход через горелку при сжигании только природного газа $\dot{m}_{ch4} = 0,4$ кг/с, при сжигании биогаза

$\dot{m}_{biogas} = 0,59$ кг/с. Результаты горения представлены в вертикальном сечении пламени на расстоянии $x = 1$ м от амбразуры комбинированного горелочного устройства.

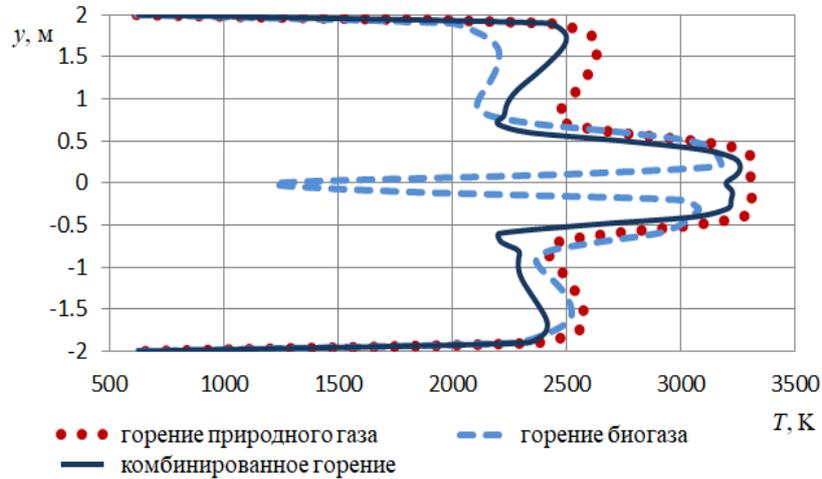


Рис. 2. Профиль температуры $T(1, y, 0)$, сравнение горения биогаза, горения природного газа и комбинированного горения природного газа и биогаза.

Литература

1. Стратегия экологической безопасности Российской Федерации на период до 2025 года / Утвержден Указом Президента РФ от 19.04.2017 г., № 176.
2. Схема и программа развития Единой энергетической системы России на 2018-2024 годы / Утвержден приказом Минэнерго России от 28.02.2018 г., № 121.
3. Сигал И. Я., Марасин А. В., Смихула А. В. Газогорелочные устройства для сжигания биогаза в котлах. Энерготехнологии и ресурсосбережение. 2014. № 3. С. 68-71.
4. ANSYS FLUENT 12.0. Theory Guide. April, 2009.
5. Anderson J. D. Computational Fluid Dynamics: The Basic with Application. New York. McCraw-Hill. 1995.
6. Chung T. J. Computational fluid dynamics. Cambridge university press, 2010.

MSC2020 76D05, 80A20, 35B40

Mathematical modeling of a swirling jet in applications to low-emission combustion of low-grade fuels

U. J. Mizher, V. N. Kovalnogov, P. A. Velmisov
Ulyanovsk State Technical University

УДК 517.9

О прохождении инвариантного тора через вырожденную резонансную зону при квазипериодическом возмущении гамильтоновой системы*

Морозов К. Е.

Нижегородский государственный университет им. Н. И. Лобачевского

Рассматриваются неконсервативные квазипериодические возмущения двумерных гамильтоновых систем

$$\begin{aligned}\dot{x} &= \frac{\partial H(x, y)}{\partial y} + \varepsilon g(x, y, \omega_1 t, \omega_2 t, \dots, \omega_m t) \\ \dot{y} &= -\frac{\partial H(x, y)}{\partial x} + \varepsilon f(x, y, \omega_1 t, \omega_2 t, \dots, \omega_m t).\end{aligned}\tag{1}$$

Уровень энергии невозмущенной гамильтоновой системы (замкнутую фазовую траекторию $H(x, y) = h_0$) назовем вырожденным, если собственная частота колебаний на этом уровне $\omega(h_0)$ принимает экстремальное значение. Если, дополнительно, $\omega(h_0)$ суть резонансное значение, то говорят о вырожденном резонансе. Изучается поведение решений в малой окрестности вырожденной резонансной фазовой кривой. Кроме того, допустим, что система

$$\begin{cases} \dot{x} = \frac{\partial H(x, y)}{\partial y} + \varepsilon \bar{g}(x, y), \\ \dot{y} = -\frac{\partial H(x, y)}{\partial x} + \varepsilon \bar{f}(x, y), \end{cases}\tag{2}$$

где

$$\begin{aligned}\bar{g}(x, y) &= \frac{1}{(2\pi)^m} \int_0^{2\pi} \dots \int_0^{2\pi} g(x, y, \theta_1, \dots, \theta_m) d\theta_1 \dots d\theta_m, \\ \bar{f}(x, y) &= \frac{1}{(2\pi)^m} \int_0^{2\pi} \dots \int_0^{2\pi} f(x, y, \theta_1, \dots, \theta_m) d\theta_1 \dots d\theta_m,\end{aligned}$$

имеет предельный цикл, положение которого контролируется значением управляющего параметра γ . При некоторых условиях, такому циклу соответствует $m + 1$ -мерный инвариантный тор в исходной системе, записанной в расширенном фазовом пространстве [1]. Пусть при некотором значении $\gamma = \gamma_0$ цикл рождается в окрестности вырожденной резонансной траектории. Представляет интерес исследование бифуркаций в резонансной зоне при изменении γ в окрестности γ_0 . Указывается, что такие бифуркации приводят к синхронизации квазипериодических колебаний. Исследование основано на анализе автономной квазигамильтоновой системы маятникового типа, полученной методом усреднения и описывающей динамику в резонансной зоне [2]. Выделяются две возможные топологические структуры невозмущенной усредненной системы, для каждой из которых найдены значения управляющего параметра, соответствующие синхронизации колебаний.

*Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект No. 20-31-90039) и Российского научного фонда (проект No. 19-11-00280).

Результаты исследования иллюстрируются на примере асимметричного уравнения типа Дуффинга–Ван дер Поля

$$\ddot{x} + x + ax^2 + x^3 = \varepsilon[\beta \sin(t) \sin(\omega_1 t) + \delta(1 - bx^2)\dot{x}], \quad (3)$$

где $|a| \in (0, 2)$, $\beta, \delta, \omega_1, b$ – параметры. Если ω_1 является иррациональным, то возмущение суть квазипериодическая функция времени. Можно показать, что невозмущенное уравнение ($\varepsilon = 0$) имеет вырожденную фазовую траекторию. [3] При $\beta = 0, b > 0$ в фазовом пространстве (3) существует предельный цикл, положение которого контролируется значением параметра b .

Литература

1. Morozov A. D., Morozov K. E. Global Dynamics of Systems Close to Hamiltonian Ones Under Nonconservative Quasi-periodic Perturbation // Russian Journal of Nonlinear Dynamics. 2019. Vol. 15, no. 2. P. 187–198.
2. Боголюбов Н. Н., Митропольский Ю. А. Асимптотические методы в теории нелинейных колебаний. Москва: Госиздательство физико-математической литературы, 1958. 408 с.
3. Морозов А. Д. Резонансы, циклы и хаос в квазиконсервативных системах. Москва-Ижевск: НИЦ Регулярная и хаотическая динамика, 2005. 424 с.

MSC2020 34C15

On the passage of an invariant torus through a degenerate resonance zone in a nearly Hamiltonian system under quasiperiodic perturbations

K. E. Morozov

Lobachevsky State University of Nizhni Novgorod

УДК 544.421

Математическое моделирование процесса каталитического синтеза трет-бутиловых эфиров с применением цеолитных катализаторов с учётом процесса диффузии*

Мугалимова Р. С.¹, Коледина К. Ф.^{1,2}

Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН¹,
Уфимский государственный нефтяной технический университет²

В настоящее время загрязнение окружающей среды приобрело глобальный масштаб. Особо остро стоит вопрос о выбросах отработанных газов автомобильным транспортом. Одним из способов решения проблемы представляется улучшение качества бензина путем повышения октанового числа. С целью снижения токсичности выхлопов в состав бензина вводятся оксигенаты (например, метил-трет-бутиловый (МТБЭ), этил-трет-бутиловый (ЭТБЭ), метил-трет-амиловый (МТАЭ)).

В настоящее время в промышленности активно используются термостойкие природные кислотные катализаторы. Предпочтительным представляется использование цеолитных катализаторов в силу возможности плавного регулирования их кислотно-основных свойств.

В настоящей работе исследованы процессы синтеза метил-трет-бутилового, этил-трет-бутилового и пропил-трет-бутилового эфиров.

Для метил-трет-бутилового эфира рассматриваются два различных процесса синтеза: под действием смешанного катализатора ($CuBr_2/HY$), а также под действием только цеолитного катализатора (HY) [1]. Синтез этил-трет-бутилового и пропил-трет-бутилового эфиров рассматривается под действием смешанного катализатора (HY, $CuBr_2/HY$). Для всех процессов имеются экспериментальные данные при различных температурах, соотношениях веществ, а также времени протекания реакций. По имеющимся данным проводится анализ по определению наиболее выгодных условий для выхода максимального количества целевого продукта, также исследуется диффузия в реагентов в цеолитах.

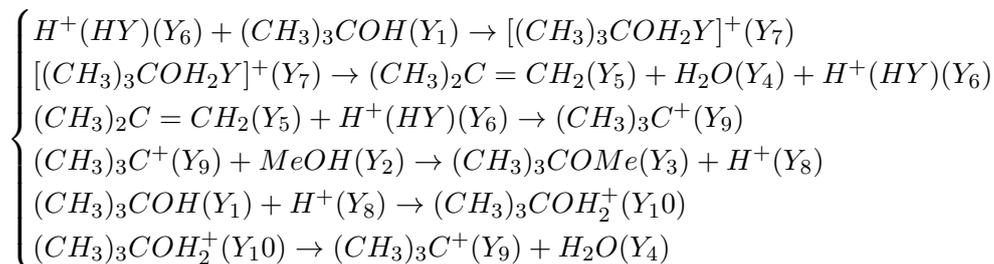
Сам цеолит HY является высокодисперсным гранулированным, высокой степени кристалличности с развитой системой транспортных пор и иерархической пористой структурой, не содержащий связующих веществ. Цеолит HY обладает высокой термической и гидротермальной стабильностью и имеет трехмерную систему полостей, сообщающихся между собой, а также имеет открытую широкопористую структуру, благодаря чему полости этого цеолита доступны для большинства реагирующих молекул [2].

Особенности диффузии реагентов в цеолитах, используемых в качестве катализаторов, обуславливаются их кристаллической структурой. Внутренняя диффузия в кристаллах цеолита описывается с помощью классического подхода.

Математическое моделирование на зерне катализатора с учетом кинетики и диффузии

*Работа выполнена по теме «Разработка новых теоретических подходов и программного обеспечения для моделирования сложных химических процессов и поиска соединений с заданными физико-химическими свойствами» (Регистрационный номер: АААА-А19-119022290011-6)

рассмотрим на примере следующей химической реакции:



Кинетические уравнения имеют следующий вид:

$$\begin{aligned} w_1 &= k_1 y_6 y_1 \\ w_2 &= k_2 y_7 \\ w_3 &= k_3 y_5 y_6 \\ w_4 &= k_4 y_9 y_2 \\ w_5 &= k_5 y_1 y_8 \\ w_6 &= k_6 y_{10} \end{aligned}$$

где $w_l, l = 1 \dots 6$ – скорость l -й стадии, моль/л·с; k_i – константа скорости для i -й стадии, [1/с, л/моль·с]; y_i – концентрация i -го вещества, моль/л.

Тогда математическая модель кинетики будет иметь вид системы обыкновенных нелинейных дифференциальных уравнений [10]:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d}{dt}(y_1) = -w_1 - w_5 \\ \frac{d}{dt}(y_2) = -w_4 \\ \frac{d}{dt}(y_3) = w_4 \\ \frac{d}{dt}(y_4) = w_2 + w_6 \\ \frac{d}{dt}(y_5) = w_2 - w_3 \\ \frac{d}{dt}(y_6) = -w_1 + w_2 - w_3 \\ \frac{d}{dt}(y_7) = w_1 - w_2 \\ \frac{d}{dt}(y_8) = w_4 - w_5 \\ \frac{d}{dt}(y_9) = w_3 + w_6 - w_4 \\ \frac{d}{dt}(y_{10}) = w_5 - w_6 \end{array} \right.$$

с начальными условиями:

$$y_2(0) = y_2^0; y_4(0) = y_4^0; y_{10}(0) = y_{10}^0; y_i(0) = 0; i = 3, 5, 7 - 8, 11 - 14.$$

С учетом построенной кинетической модели реакций разработана математическая модель массопереноса на зерне катализатора. Полученная система приведена в форму решателя для ПС MATLAB, рассчитаны изменения концентраций компонентов Y_i исходной реакции в зависимости от времени реакции и зерна катализатора.

Литература

1. Байгузина А.Р., Галлямова Л.И., Хуснутдинов Р.И. Синтез алкил-трет-бутиловых эфиров в присутствии цеолитных катализаторов. Вестник Башкирского университета. 2020. Т. 25, № 4. С. 748-755.
2. Шавалеева Н.Н. Синтез и свойства гранулированных ультрастабильных цеолитов Y , не содержащих связующих веществ. Дис. ... канд. хим. наук. Уфа, 2016. 110 с.

3. Вэйлас С. Химическая кинетика и расчеты промышленных реакторов. Москва. Из-во: Химия. 1967. 416 с.
4. Левеншпиль О. Инженерная химия гетерогенного катализа. Москва: Химия. 1984. 650 с.
5. Загоруйко А.Н. Основы математического моделирования каталитических реакторов. Новосибирск: Химия. 2015. 64 с.
6. Миньков Л.Л., Шрагер Э.Р. Основные подходы к численному решению одномерных уравнений газовой динамики: учеб. пособие. Томск: STT, 2016. 136 с.
7. Мороз Л.И., Масловская А.Г. Решение дифференциальных задач методом конечных элементов. Благовещенск: Амурский гос. ун-т, 2019.
8. Слабнов В. Д. Численные методы. Санкт-Петербург: Лань, 2020. 392 с.
9. Toppinen S., Rantakyla T.-K., Salmi T., Aittamaa J. Kinetics of the liquid-phase hydrogenation of benzene and some monosubstituted alkylbenzenes over a nickel catalyst // *Ind. Eng. Chem. Res.* 1996. Vol. 35. pp. 1824-1833.
10. Коледина К.Ф., Коледин С.Н., Щаднева Н.А., Губайдуллин И.М. Кинетика и механизм каталитической реакции спиртов с диметилкарбонатом // *Журнал физической химии.* 2017. Т. 91, № 3. С. 422-428.
11. Зайнуллин Р.З., Коледина К.Ф., Ахметов А.Ф., Губайдуллин И.М. Кинетика каталитического риформинга бензина // *Кинетика и катализ.* 2017. Т. 58, № 3. С. 292–303.
12. Байгузина А.Р., Галлямова Л.И., Хуснутдинов Р.И. Синтез алкил-трет-бутиловых эфиров в присутствии цеолитных катализаторов. *Вестник Башкирского университета.* 2020. Т. 25, № 4. С. 748-755.
13. Коледина К.Ф., Губайдуллин И.М., Коледин С.Н. Идентификация условий каталитической реакции по многоцелевой оптимизации // *Математическое моделирование процессов и систем: Коллективная монография по материалам пленарных докладов X Международной научно-практической конференции (27–31 октября 2020 г., г. Стерлитамак).* С. 149-166.
14. Грачев Г.А., Бесков В.С., Ионе К.Г., Малиновская О.А., Слинько М.Г. Сравнение эффективных коэффициентов диффузии в пористых катализаторах, измеренных различными методами // *Кинетика и катализ.* 1971. Т. 12, № 5. С. 1301-1305.
15. Слинько М.Г., Баснер М.Е. О наблюдаемой кинетике сложной реакции с линейной кинетической моделью в области внутренней и внешней диффузии // *Кинетика и Катализ.* 1971. Т. 12, № 3. С. 744-748.

MSC2020 544.421

Mathematical modeling of the process of catalytic synthesis of tert-butyl esters using zeolite catalysts, taking into account the diffusion process

R. S. Mugalimova¹, K. F. Koledina^{1,2}

Institute of Petrochemistry and Catalysis of RAS¹,
Ufa State Petroleum Technological University²

УДК 517.9

Об одной математической модели интегрированной энергетической системы на основе уравнений Вольтерра с разрывным ядром*

Муфтахов И. Р.¹, Карамов Д. Н.¹, Жуков А. В.²

Институт систем энергетики им. Л.А. Мелентьева Сибирского отделения
Российской академии наук¹,
Байкальский институт БРИКС Иркутского национального исследовательского
технического университета²

В работе рассматриваются новые методы математического моделирования режимов работы интегрированных микросистем с возобновляемой генерацией и аккумулярованием энергии, учитывающие свойства и особенности взаимодействия энергетических систем разного уровня. В частности приводится анализ климатических особенностей зоны озера Байкал [1], используется передовой опыт внедрения как интегрированных, так и автономных энергетических систем с высокой долей возобновляемой генерации [2]. Единая математическая модель интегрированной энергетической системы, которая учитывает основные режимные параметры и множественные связи между элементами генерации, преобразования, распределения, аккумулярования и потребления энергии, базируется на нелинейных интегральных уравнениях Вольтерра первого рода с разрывным ядром [3]:

$$\left\{ \begin{array}{l} \int_0^t \begin{pmatrix} h_1(t, \tau, x_1(\tau), x_2(\tau), \dots, x_n(\tau)) d\tau \\ h_2(t, \tau, x_1(\tau), x_2(\tau), \dots, x_n(\tau)) d\tau \\ \dots \\ h_m(t, \tau, x_1(\tau), x_2(\tau), \dots, x_n(\tau)) d\tau \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1(t) \\ f_2(t) \\ \dots \\ f_m(t) \end{pmatrix}, \\ v_i(t) = \int_0^t x_i(\tau) d\tau, \max_{t \in [0, T]} v_i(t) \leq v_{i \max}, \\ E_{i \min}(t) \leq \int_0^t v_i(\tau) d\tau \leq E_{i \max}(t), \\ 0 < \alpha_1(t) < \alpha_2(t) < \dots < \alpha_{n-1}(t) < t, \end{array} \right. \quad (1)$$

где $t \in [0, T]$, ядра $h_i(t, \tau, x_1(\tau), x_2(\tau), \dots, x_n(\tau))$ претерпевают разрывы на кривых $a_j(t)$,

*Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и Правительства Иркутской области в рамках научного проекта № 20-48-383004.

$j = 1, 2, \dots, n - 1$ и определяются следующим выражением

$$h_i(t, \tau, x_1(\tau), x_2(\tau), \dots, x_n(\tau)) d\tau = \begin{cases} K_{i,1}(t, \tau)G_{i,1}(t, x_1(\tau)), t, \tau \in p_1 \\ K_{i,2}(t, \tau, G_{i,2}(t, x_2(\tau)), t, \tau \in p_2 \\ \dots \\ K_{i,n}(t, \tau, G_{i,n}(t, x_n(\tau)), t, \tau \in p_n \end{cases} . \quad (2)$$

На основе проведенного анализа выполнены расчеты режимных параметров аккумуляющих устройств с использованием интегральных уравнений Вольтерра и с учетом нелинейной характеристики КПД, а также актинометрических показателей для природоохранной зоны озера Байкал. Также в расчетах использован прогноз ветроэнергетического потенциала рассматриваемого региона, основанный на использовании гибридного подхода: объединении глобального численного прогноза погоды и модели машинного обучения, основанной на алгоритме XGBoost, для достижения приемлемой точности [1].

Литература

1. Muftahov I., Sidorov D., Zhukov A., Karamov D. (2021) Volterra Model of Energy Storage with Nonlinear Efficiency in Integrated Power Systems. In: Allahviranloo T., Salahshour S., Arica N. (eds) Progress in Intelligent Decision Science. IDS 2020. Advances in Intelligent Systems and Computing, vol 1301. Springer, Cham.
https://doi.org/10.1007/978-3-030-66501-2_65
2. Karamov D., Muftahov I., Zhukov A. Increasing Storage Battery Lifetime in Autonomous Photovoltaic Systems with Power Generation Structure Varying Throughout the Year. E3S Web Conf. 289 05006 (2021) DOI: 10.1051/e3sconf/202128905006
3. Sidorov D, Tynda A, Muftahov I, Dreglea A, Liu F. Nonlinear Systems of Volterra Equations with Piecewise Smooth Kernels: Numerical Solution and Application for Power Systems Operation. Mathematics. 2020; 8(8):1257. <https://doi.org/10.3390/math8081257>

MSC2020 45D05

On one mathematical model of an integrated energy system based on the Volterra equations with discontinuous kernels

I. R. Muftahov¹, D. N. Karamov¹, A. V. Zhukov²

Energy Systems Institute, Siberian Branch of Russian Academy of Sciences¹,
Baikal School of BRICS, Irkutsk National Research Technical University,²

УДК 532.591

К вопросу о моделировании внутренних волн в газонефтяном пласте

Онегов Н. А.

Санкт-Петербургский горный университет

Волны на поверхности жидкости – характерное явление для нашего мира. Большой вклад в развитие теории движения жидкости внесли Леонард Эйлер и Жозеф Луи Лагранж. В настоящее время, когда все приборы максимально точны, остро стоит вопрос экономической рентабельности – зачастую новый, весьма точный прибор является дорогим. Из этого следует другая проблема: стоит ли учитывать все показатели или некоторыми можно пренебречь?

Целью исследования является изучение гидродинамических показателей волновых функций. В работе поставлена задача об установлении влияния волн малой амплитуды в реальных условиях в рассматриваемых процессах.

В докладе рассмотрено влияние волн малой амплитуды в газонефтяном пласте на основные параметры флюида, решена задача значимости исследуемых показателей в реальных условиях. Рассмотрена задача о движении трех слоев идеальной неоднородной жидкости над горизонтальным твердым недеформируемым дном – исследуемый пласт в первом приближении. На основании гидродинамических уравнений и граничных условий найдены аналитические решения краевой задачи, представленные в виде совокупности двух компонент: начальной и добавочной. Искомые гидродинамические характеристики определены с точностью амплитуды волны. Влияние третьей фазы учитывается в виде суперпозиции параметров.

В статье построены поверхности колебательного движения, численно и аналитически смоделировано движение, которое позволяет судить о степени значимости волн малой амплитуды, а также изучено влияние волновых процессов на основные параметры флюида. Установлено, что внутренние волны оказывают существенное влияние на колебание давлений в пласте и могут повлиять на протекание химических процессов. Процессы изменения давления в трехфазной среде могут вызвать изменение времени протекания химических реакций, что является достаточно значимым фактором, поскольку простой той или иной скважины в течение времени её обработки с целью интенсификации и увеличения притока абсолютно нерентабелен. С учетом данных колебаний можно производить корректировки времени обработки скважин с целью рационализации процессов воздействия на пласт. Также численно доказано, что наличие газовой шапки значительно влияет на вид свободной поверхности нефти.

Литература

1. Harald E. Krogstad, Oilvind A. Arntsen Linear wave theory Part A-Regular waves. Trondheim: Norwegian university of science and technology trondheim, 2000. 42 p.
2. Перегудин С. И. Волновые движения в жидких и сыпучих средах. СПб.: Изд-во Санкт-Петерб. ун-та, 2004. 288 с.
3. Алешков Ю. З. Волны на поверхности сыпучих сред, вызванные потоком жидкости // Вестник Санкт-Петербургского университета. Сер. 1. 2002. Вып. 4. № 25. С. 34–43.

4. Цапаев С. Гравитационно-капиллярные волны на поверхности жидкости. Долгопрудный: Изд-во Московского физико-технического университета, 2019. 13 с.
5. Смирнов Д. С., Ланина О. В. Особенности разработки подгазовой зоны и газовой шапки залежи АВ1-5 Самотлорского месторождения // Экспозиция Нефть Газ. 2018. № 7 (67). С. 24-27.

MSC2020 76B10

Modeling of internal waves in the gas and oil reservoir

N. A. Onegov

Saint-Petersburg Mining University

УДК 517.926

Об одном необходимом условии приводимости линейных систем дифференциальных уравнений

Пашуткин Д. В.

ООО "Центр разработки и исследований"

Пусть задана линейная система дифференциальных уравнений

$$\frac{dx}{dt} = A(t)x, \quad (1)$$

где $x \in R^n$, $A(t)$ — непрерывная $n \times n$ матрица, $t \in [T, +\infty)$.

Рассматривается вопрос о приводимости системы (1) в классическом смысле, т. е. существовании преобразования Ляпунова $y = L(t)x$, с помощью которого система (1) может быть преобразована к системе с постоянной матрицей ([1], с. 158):

$$\frac{dy}{dt} = By. \quad (2)$$

Вопросам приводимости посвящен целый ряд работ. Как правило, ставится задача поиска достаточных условий, при которых система (1) приводима к системе (2) с заранее заданной матрицей B .

Известны также и необходимые признаки приводимости: например, требование правильности системы ([1], с. 170).

В докладе предложено новое необходимое условие приводимости (1). При этом конкретный вид матрицы B предполагается неизвестным. За основу взята идея из работы [2].

Одним из характерных свойств системы (2) является свойство:

$$Y(t+s) = Y(t)Y(s)$$

или

$$Y(t) = Y(t+s)Y^{-1}(s), \quad (3)$$

где $Y(t)$ — её фундаментальная матрица, $Y(0) = E$.

В случае приводимости системы (1) естественно ожидать наличия у её решений похожих свойств.

Действительно, если система (1) приводима, то при всех $t, s \in [T, +\infty)$ и некоторых постоянных $k_1, k_2, k_3, k_4 > 0$ справедливы неравенства, являющиеся в некотором смысле аналогом соотношения (3):

$$k_1 \|X(t)\| \leq \|X(t+s)X^{-1}(s)\| \leq k_2 \|X(t)\|, \quad (4)$$

$$k_3 \exp\left(\int_T^t SpA(s)ds\right) \leq \exp\left(\int_s^{t+s} SpA(s)ds\right) \leq k_4 \exp\left(\int_T^t SpA(s)ds\right), \quad (5)$$

где $X(t)$ — фундаментальная матрица системы (1).

Неравенства (4) и (5) дают необходимые условия приводимости системы (1). С помощью этого признака можно установить факт неприводимости системы дифференциальных уравнений из известного примера ([1], с.231) при

$$A(t) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ \frac{2}{t^2} & 0 \end{pmatrix},$$

где $t \geq 1$.

Здесь

$$X(t) = \begin{pmatrix} t^2 & \frac{1}{3}t \\ \frac{2}{t} & -\frac{1}{3}t^2 \end{pmatrix},$$
$$X(t+s)X^{-1}(s) = \begin{pmatrix} \frac{(t+s)^2}{3}s^2 + \frac{2s}{3}(t+s) & \frac{(t+s)^2}{3}s^2 - \frac{s^2}{3}(t+s) \\ \frac{2(t+s)}{3}s^2 - \frac{2s}{3}(t+s)^2 & \frac{2(t+s)}{3}s + \frac{s^2}{3}(t+s)^2 \end{pmatrix}.$$

Легко видеть, что при неограниченном росте $t = s$ левая часть неравенства (4) не выполняется.

Литература

1. Демидович Б. П. Лекции по математической теории устойчивости. М.: Изд-во Моск ун-та, 1998. 480 с.
2. Пашуткин Д. В. О неприводимости нелинейных дифференциальных уравнений // Труды Второй Всероссийской научной конференции (1–3 июня 2005 г.). Часть 3, Дифференциальные уравнения и краевые задачи, Матем. моделирование и краев. задачи, СамГТУ, Самара. 2005. С. 190–193.

MSC2020 34C20

On a necessary condition for the reducibility of linear systems of differential equations

D. V. Pashutkin

Development and research centre Ltd

УДК 517.986.7

Касание по Чернову и автопредставление ограниченных функций

Рассадин А. Э.

Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»

Развитие теории полугрупп, зародившейся в середине прошлого века, привело к появлению большого числа мощных инструментов математического исследования для различных разделов современного функционального анализа [1]. К таким инструментам, в частности, относятся аппроксимационные теоремы теории полугрупп [2]. В данной работе представлен ряд новых результатов, основанных на одной из теорем этого типа – теореме Чернова [3].

Пусть $UC_b(\mathbb{R})$ – пространство всех равномерно непрерывных ограниченных функций $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, снабжённое равномерной нормой $\|f\| = \sup_{x \in \mathbb{R}} |f(x)|$, тогда справедливо следующее утверждение.

Теорема 1. Если ξ_0 и γ – произвольные положительные числа и $f \in UC_b(\mathbb{R})$, то:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \sup_{\xi \in [-\xi_0, \xi_0]} \|f - \hat{S}_n^\gamma(\xi)f\| = 0, \quad (1)$$

где

$$(\hat{S}_n^\gamma(\xi)f)(x) = \frac{\exp(\gamma|\xi|)}{2^n} \sum_{k=0}^n C_n^k \left(1 - \frac{2\gamma|\xi|}{n}\right)^k f\left(x + \frac{2k-n}{n}\xi\right), \quad (2)$$

а C_n^k – биномиальные коэффициенты.

Доказательство. Рассмотрим задачу Коши для линейного уравнения переноса с постоянными вещественными коэффициентами $v \neq 0$ и $\sigma > 0$:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + v \frac{\partial u}{\partial x} + \sigma u = 0, \quad u(x, 0) = f(x), \quad x \in \mathbb{R}. \quad (3)$$

Как хорошо известно, точное решение задачи (3) имеет вид:

$$u(x, t) = \exp(-\sigma t) f(x - vt) \equiv (\hat{Q}(t)f)(x), \quad (4)$$

где $\hat{Q}(t)$ – оператор полугруппы.

С другой стороны, если начальное условие $f \in UC_b(\mathbb{R})$, то все условия теоремы 3 из статьи [4] выполнены, значит, точное решение (4) уравнения (3) может быть выражено через функцию Чернова $\hat{G}(t)$ следующим образом:

$$u(x, t) = \lim_{n \rightarrow \infty} \hat{G}^n\left(\frac{t}{n}\right) f(x), \quad (5)$$

где в соответствии с теоремой 2 из статьи [4]:

$$(\hat{G}(t)f)(x) = \frac{(1 - 2\sigma t) f(x) + f(x - 2vt)}{2}. \quad (6)$$

Используя известное представление оператора сдвига в виде операторной экспоненты (см., например, [2], главу 7), можно выделить функцию Чернова $\hat{G}(t)$ из формулы (6) явно:

$$\hat{G}(t) = \frac{1}{2} \left[1 - 2\sigma t + \exp\left(-2vt \frac{\partial}{\partial x}\right) \right]. \quad (7)$$

Подставляя формулу (7) в выражение (5) и сравнивая результат этой подстановки с формулой (4), получим:

$$\exp(-\sigma t) f(x - vt) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{2^n} \sum_{k=0}^n C_n^k \left(1 - \frac{2\sigma t}{n}\right)^k f\left(x - \frac{2(n-k)}{n} vt\right). \quad (8)$$

Переобозначая в равенстве (8) $x - vt \mapsto x$ и вводя новые величины $\xi = vt$ и $\gamma = \sigma/|v|$, приходим к утверждению теоремы.

Доказательство завершено.

Полагая в формуле (2) $\xi = x$, получим, что для этой теоремы справедливо следующее

Следствие 1. Пусть $f \in UC_b(\mathbb{R})$ и γ – произвольное положительное число, тогда:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \|f - \hat{\sigma}_n^\gamma f\| = 0, \quad (9)$$

где

$$(\hat{\sigma}_n^\gamma f)(x) = \frac{\exp(\gamma|x|)}{2^n} \sum_{k=0}^n C_n^k \left(1 - \frac{2\gamma|x|}{n}\right)^k f\left(\frac{2kx}{n}\right). \quad (10)$$

Доказанная выше теорема означает, что с любой наперёд заданной точностью функция $f \in UC_b(\mathbb{R})$ может быть представлена линейной комбинацией достаточно большого числа сдвигов её самой. Например, если $f(x) = (1+x^2)^{-1}$, то для этой функции формулы (1) и (2) сводится к:

$$\frac{1}{1+x^2} = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\exp(\gamma|\xi|)}{2^n} \sum_{k=0}^n \left(1 - \frac{2\gamma|\xi|}{n}\right)^k \frac{n^2 C_n^k}{n^2 + (nx + (2k-n)\xi)^2}.$$

Согласно же следствию теоремы любая функция $f \in UC_b(\mathbb{R})$ представляется линейной комбинацией растянутых копий её же, в частности, для функции из предыдущего примера формулы (9) и (10) дают:

$$\frac{1}{1+x^2} = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\exp(\gamma|x|)}{2^n} \sum_{k=0}^n \left(1 - \frac{2\gamma|x|}{n}\right)^k \frac{n^2 C_n^k}{n^2 + 4k^2 x^2}.$$

Литература

1. Хилле Э., Филлипс Р. Функциональный анализ и полугруппы. М.: Издательство иностранной литературы, 1962. 830 с.
2. Engel K.-J., Nagel R. One-parameter semigroups for linear evolution equations. Springer, 2000. 589 p.
3. Chernoff P. R. Note on product formulas for operator semigroups // Journal of Functional Analysis. 1968. Vol. 2, No. 2. pp. 238 – 242.
4. Remizov I. D. Approximations to the solution of Cauchy problem for a linear evolution equation via the space shift operator (second-order equation example) // Applied Mathematics and Computation. 2018. Vol. 328, No. 1. pp. 243–246.

MSC2020 35A35, 35C99, 35K15, 35K30

The Chernoff tangency and the autorepresentation of bounded functions

A. E. Rassadin

HSE University

УДК 530.145

Свойства баллистического электронного транспорта в системе из двух сцепленных колец, находящейся в магнитном поле*

Смолкина М. О., Попов И. Ю., Блинова И. В.

Университет ИТМО

Существует ряд исследований, описывающих спектральные и рассеивающие свойства системы, состоящей из колец или цепочек колец [1, 2]. Наибольший интерес при изучении этих свойств вызывает вопрос управления электронным транспортом. Как показывает ряд работ, манипулирование величиной магнитного поля позволяет управлять электронным транспортом в наноструктурах [3,4]. Квантовые графы, на основе которых строятся модели, в упомянутых выше статьях плоские. Такие модели не позволяют управлять электронным транспортом путем изменения направления внешнего магнитного поля. В настоящей работе предлагается конструкция, состоящая из двух ортогональных колец (т. е., граф не плоский), которая позволяет управлять прохождением электронов за счет направления магнитного поля или, другими словами, за счет ориентации конструкции в зависимости от направленности магнитного поля. Среди макромолекул можно найти структуры такого типа, например, молекулы дифенила. Молекула дифенила состоит из двух сцепленных некомпланарных колец в растворах, а в кристаллах кольца принимают компланарное положение. На данный момент существуют работы, описывающие свойства электронного транспорта и незатухающего тока для дискретной модели дифенила [5].

В настоящей работе рассмотрена непрерывная модель из двух сцепленных в одной точке колец, причем, одно кольцо располагается в плоскости ZOY , а второе в плоскости XOY . У левого кольца есть входящий провод, у правого исходящий. При этом предполагается, что правое кольцо может вращаться относительно оси Y , в то время как левое кольцо зафиксировано относительно Y . Также стоит отметить, что система находится в магнитном поле и вектор магнитного поля направлен вдоль оси Z . Для сформулированной модели построено и решено уравнение Шредингера на кривой, получены выражения для волновых функций на ребрах графа. Поскольку волновая функция должна быть непрерывной и плотность тока должна сохраняться в местах соединения колец с проводами и в точке связи, для вершин графа сформулированы магнитные условия Кирхгофа. Также получены выражения для коэффициентов прохождения и отражения электронов. В ходе численного моделирования были проиллюстрированы свойства электронного транспорта в построенной системе. Также было изучено влияние различных параметров системы: α – угла поворота относительно оси Y , радиусов колец, волнового числа k , углов между точкой соединения колец и входящим (исходящим) проводом, магнитной индукции B на коэффициенты прохождения и отражения электронов. Тестирование данной модели на различных наборах значений физических и геометрических параметров системы позволило выявить случаи, когда коэффициент прохождения (отражения) электронов равен 1, т. е. имеет место полное прохождение (отражение) электронного транспорта через систему. Также был рассмотрен случай, когда оба кольца компланарны, то есть $\alpha = \pi$, и показано, что полученные результаты соотносятся с уже изученными ранее моделями [6].

*Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 19-31-90164

Литература

1. Chatterjee A., Popov I. Yu., Smolkina M. O. Persistent current in a chain of two Holstein-Hubbard rings in the presence of Rashba spin-orbit interaction // *Nanosystems: Physics, Chemistry, Mathematics.*, 2019. Vol. 10. No. 1. pp. 50-62.
2. Naeimi A., Eslami L., Esmailzadeh M., Abolhassani M. R. Spin transport properties in a double quantum ring with Rashba spin-orbit interaction // *Appl. Phys.* 2013. Vol. 113. pp. 014303.
3. Geyler V. A., Popov I. Yu. Quantum interference rectifier // *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures.* 2001. Vol. 9. No. 4. pp. 631-634.
4. Dehghan E., Khoshnoud D. S., Naeimi A. Logical spin-filtering in a triangular network of quantum nanorings with a Rashba spin-orbit interaction // *Physica B Condensed Matter.* 2018. Vol. 529. pp. 21-26.
5. Kondo H., Nara J., Kino H. Ohno N. Transport properties of a biphenyl-based molecular junction system the electrode metal dependence // *J. Phys.: Condens. Matter.* 2009. Vol. 21. pp. 064220.
6. Smolkina M. O., Popov I. Yu., Blinova I. V. The spin-filtering properties in two coupled Rashba quantum rings // *Journal of Physics: Conference Series.* 2020. Vol. 1695. No. 1. pp. 012174.

MSC2020 81Q80

Ballistic Electronic Transport Properties in a System of Two Chained Orthogonal Rings

M. O. Smolkina, I. Yu. Popov, I. V. Blinova

ITMO University

УДК 519.622.2

О численном решении дифференциально-алгебраических уравнений второго порядка*

Соловарова Л. С.¹, Фьюнг Т. Д.²

Институт динамики систем и теории управления имени В. М. Матросова
Сибирского отделения Российской академии наук¹,
Институт математики Вьетнамской Академии Наук и Технологий²

Обыкновенные дифференциальные уравнения (ОДУ) различных порядков один из основных инструментов для моделирования важных прикладных задач. Если все уравнения одинакового порядка, то они образуют систему ОДУ. Если процесс или явление описываются взаимосвязанными ОДУ различных порядков и трансцендентными (конечномерными) уравнениями, то, объединяя их, получим систему ОДУ с тождественно вырожденной матрицей перед старшей производной. Такие системы принято называть дифференциально-алгебраическими уравнениями (ДАУ). Если порядок такой системы выше первого, то их называют ДАУ высокого порядка.

К настоящему времени бурно развиваются качественная теория и численные методы решения ДАУ первого порядка (как для начальной, так и для краевой задачи). Весьма полная библиография представлена, например, в монографии [1]. Для ДАУ высокого порядка обычно применяют следующий стандартный подход [2]. Путем введения новой вектор-функции размерности nk (n – размерность исходной задачи, k – порядок ДАУ) записывают эту задачу в виде ДАУ первого порядка. Такое преобразование имеет ряд недостатков: увеличивает размерность в k раз и значительно ухудшает свойства полученной задачи.

Отметим также, что к настоящему времени статей, посвященных численному решению ДАУ высокого порядка очень мало. Работа [3] посвящена применению неявного метода Эйлера для рассматриваемых задач.

В докладе для ДАУ второго порядка вида

$$A(t)x''(t) + B(t)x'(t) + C(t)x(t) = f(t), \quad t \in [0, 1], \quad (1)$$

$$x(0) = x_0, \quad x'(t)|_{t=0} = x'_0, \quad (2)$$

где $A(t), B(t), C(t)$ – $(n \times n)$ -матрицы, $f(t)$ и $x(t)$ – заданная и искомая n -мерные вектор-функции, соответственно, $x_0, x'_0 \in R^n$, $\det A(t) \equiv 0$, предлагаются многшаговые методы, построение которых основано на идеях из [4].

Литература

1. Lamour R., März R., Tischendorf C. Differential-Algebraic Equations: A Projector Based Analysis. Springer, 2013. 649 p.
2. Mehrmann V., Shi C. Transformation of high order linear differential-algebraic systems to first order // Numerical Algorithms. 2006. No. 42. pp. 281-307.

*Работа выполнена при финансовой поддержке проекта РФФИ 20-51-54003

3. Sand J. On implicit Euler and related methods for high-order high-index DAEs. // Applied Numerical Mathematics. 2002. No 42. pp. 411-424.
4. Булатов М. В., Ли Минг Гонг, Соловарова Л. С. О разностных схемах первого и второго порядков для дифференциально-алгебраических уравнений индекса не выше двух // Журнал вычисл. математики и матем. физики. 2010. Т. 50, № 11. С. 1909-1918.

MSC2020 65L80

On the numerical solution of differential-algebraic equations of the second order

L. S. Solovarova¹, Ta Duy Phuong²

Matrosov Institute for System Dynamics and Control Theory of SB RAS¹,
Institute of Mathematics, Vietnam Academy of Science and Technology²

УДК 51-72:519.632

О погрешности расчета температурного поля в плоской среде с включениями

Сыромясов А. О., Понкротова Ю. В., Меньшакова Т. В.

Национальный исследовательский Мордовский государственный университет

Одной из сторон изучения современных композитных материалов является изучение распространения тепла в них. Неформальное описание соответствующей задачи таково. Среда содержит включения с иной теплопроводностью. Вдали от этих включений (на условной «бесконечности») поле температуры известно. Требуется выяснить, какие искажения вносят в него инородные тела. Распределение температуры во многих случаях можно считать стационарным.

С математической точки зрения имеется неограниченная область в \mathbb{R}^2 или \mathbb{R}^3 , внутри которой расположены области-включения $\Omega(1), \dots, \Omega(K)$ с границами $\partial\Omega(1), \dots, \partial\Omega(K)$. Температура вне включений задается функцией T_f , а внутри k -го включения – функцией $T_p(k)$, соответственно. Для простоты будем считать теплопроводности среды и инородных тел постоянными и равными $\kappa_f, \kappa_p(1), \dots, \kappa_p(K)$, соответственно. Тогда в силу стационарности температурного поля

$$\nabla^2 T_f = 0, \quad \nabla^2 T_p(k) = 0, \quad k = 1, \dots, K. \quad (1)$$

Квадрат символического оператора набла обозначает оператор Лапласа.

На границах инородных тел выполняются условия непрерывности температуры и теплового потока:

$$T_f = T_p(k), \quad \kappa_f \frac{\partial T_f}{\partial n} = \kappa_p(k) \frac{\partial T_p(k)}{\partial n}, \quad \vec{x} \in \partial\Omega(k), \quad k = 1, \dots, K. \quad (2)$$

Здесь и далее \vec{x} есть радиус-вектор точки среды относительно начала O некоторой декартовой прямоугольной системы координат (Ox_1x_2 на плоскости или $Ox_1x_2x_3$ в пространстве). Вектор \vec{n} представляет собой единичную внешнюю нормаль к поверхности $\partial\Omega(k)$.

Распределение температуры на бесконечности описывается известной функцией T_∞ :

$$T_f \rightarrow T_\infty(\vec{x}), \quad |\vec{x}| \rightarrow \infty. \quad (3)$$

Как правило, T_∞ не более чем линейна по координатам:

$$T_\infty(\vec{x}) = T_0 + T_j x_j, \quad T_0 = \text{const}, \quad T_j = \text{const}, \quad j = 1, 2, 3. \quad (4)$$

По повторяющимся индексам производится суммирование в пределах от 1 до размерности пространства (2 в \mathbb{R}^2 , 3 в \mathbb{R}^3).

Простейший пример задачи (1)–(4) разобран в [1]: аналитически найдено распределение температуры вне и внутри одиночной сферической частицы, находящейся в безграничной среде под действием постоянного градиента температуры.

Если в среде расположены хотя бы два инородных тела (даже такой простой формы, как сфера или круг), аналитическое решение поставленной задачи резко усложняется. При решении аналогичных задач о распространении электрического поля используются бисферические или биполярные координаты [3]. Однако этот подход не распространяется

на число инородных тел, большее двух, а потому фактически является тупиковым. Т. о., задача (1)–(3) может быть решена либо асимптотическими, либо численными методами.

Применение асимптотических разложений создает две проблемы. Во-первых, такие разложения могут быть расходящимися. Во-вторых, иногда достаточно затруднительно определить, на каком слагаемом следует прервать их, чтобы обеспечить заданную точность вычислений [4].

С другой стороны, проблемой численного решения (помимо очевидного вопроса о выборе метода) является выполнение соотношения (3). Расчетная область в любом случае конечна, поэтому следует выяснить, какими должны быть ее размеры и какие условия задать на ее границах, чтобы хотя бы приближенно удовлетворить условие при $|\vec{x}| \rightarrow \infty$.

Соответственно, желательно иметь методику подбора размеров расчетной области, а также хотя бы «экспериментальное» доказательство сходимости асимптотических разложений решения (1)–(3). Решению этих двух проблем для плоской среды и посвящена предлагаемая работа.

Уточним постановку задачи. Всего в среде помещаются две одинаковые круглые частицы $\Omega(1)$ и $\Omega(2)$ с теплопроводностями κ_p и радиусами a ; центр первой частицы помещен в начало координат O , а второй – в точку с координатами $(r; 0)$. Температура на бесконечности удовлетворяет (4).

Асимптотический метод решения этой задачи был предложен в [2]. Он связан с представлением T_f и T_p в виде линейной комбинации мультиполей – частных производных от фундаментального решения уравнения Лапласа – а также с введением малого параметра $\varepsilon = a/r$, по которому раскладываются коэффициенты мультипольного представления. В рамках настоящего исследования точность разложения была доведена до ε^5 .

Численно задача решалась с помощью метода конечных элементов в пакете ANSYS Workbench.

Расчетная область была взята в форме квадрата, стороны которого имеют длину H и параллельны координатным осям. Центр квадрата совпадал с точкой O . Если H достаточно велика, то градиент температуры на бесконечности можно описать, задав подходящие ее значения на противоположных сторонах квадрата. Например, если $\nabla T_\infty = (T_1, 0)$, то можно положить

$$T_1 = \frac{T_{right} - T_{left}}{H}, \quad (5)$$

где $T_{right} = T_\infty(H/2, x_2)$, $T_{left} = T_\infty(-H/2, x_2)$ – постоянные значения T_∞ на правой и левой сторонах квадрата.

На самом деле (5) выполняется лишь приближенно: частицы взвеси вносят искажение в распределение температуры, так что T_f на сторонах квадрата не равна T_∞ . Возникает вопрос: как подобрать H , чтобы нивелировать эту ошибку.

С этой целью вначале выполняется расчет для среды с единственным включением $\Omega(1)$. В этом случае аналитическое решение задачи (1)–(4) известно точно, что позволяет найти относительную погрешность численного решения. Более подробно, полученные приближенные значения возмущения температуры сравниваются с точными, а затем погрешность осредняется вдоль окружностей различных радиусов с общим центром O . Величина H подбирается так, чтобы средняя погрешность $\langle \delta_T \rangle$ на всех интересующих нас окружностях (т.е. в интересной для нас окрестности частицы) не превышала заданную величину; в качестве таковой было выбрано значение 10%.

Основываясь на полученных результатах, определяется размер расчетной области и в задаче о двух включениях. Для этого, используя разложение [2], доказываем, что на больших расстояниях от $\Omega(1)$ и $\Omega(2)$ суммарный эффект от присутствия в среде двух тел такой же, как и от одного тела Ω_F с той же теплопроводностью, но большего радиуса. Заменяв систему « $\Omega(1) + \Omega(2)$ » фиктивной частицей Ω_F , можно определить подходящий

размер расчетной области для нее, а значит, и для исходной системы.

Дополнительная трудность при моделировании термодинамического взаимодействия двух частиц состоит в том, что вектор ∇T_∞ может быть не параллельным оси Ox_1 , на которой лежат центры обеих частиц. Имеется два способа решения этой проблемы. Во-первых, можно воспользоваться линейностью исходной задачи и выполнить два расчета: один – для ∇T_∞ , направленного вдоль оси Ox_1 , второй – для ∇T_∞ , направленного вдоль Ox_2 . Во-вторых, на границе расчетной области можно задавать граничные условия, более сложные, чем (5) и зависящие от параметра.

Результаты расчетов затем сравниваются с численными значениями возмущения температуры, полученного в ходе асимптотического разложения. Для исследования сходимости асимптотического разложения рассматривается несколько различных его «срезов»: с точностью до $\varepsilon^0, \varepsilon^2, \dots, \varepsilon^5$.

Литература

1. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теоретическая физика. Т. VI. Гидродинамика. М. : Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1986. 736 с.
2. Меньшакова Т. В., Сыромясов А. О. Термодинамическое взаимодействие двух круглых частиц на плоскости // Математическое и компьютерное моделирование естественно-научных и социальных проблем. Материалы XIII Международной научно-технической конференции молодых специалистов, аспирантов и студентов (Пенза, 3–6 июня 2019 г.). Пенза, 2019. С. 167–171.
3. Liu H., Bau H. H. The dielectrophoresis of cylindrical and spherical particles submerged in shells and in semi-infinite media // *Physics of Fluids*. 2004. V. 16. N 5. P. 1217–1228.
4. Naifeh Ali H. *Perturbation methods*. John Wiley and Sons, 2000.

MSC2020 80A19, 80M10, 80M35, 35Q79

On the error of calculation of the temperature field in plane medium with inclusions

A. O. Syromyasov, Yu. V. Ponkratova, T. V. Menshakova
National Research Mordovia State University

УДК 517.9:532.5:539.3

Исследование динамических процессов в системах измерения давления газожидкостных сред *

Тамарова Ю. А., Вельмисов П. А., Алексанин Н. Д., Нуруллин Н. И.

Ульяновский государственный технический университет

Ввиду постоянного развития техники необходимо улучшать и разрабатывать новые типы первичных преобразователей, в частности, датчики давления [1–6], характеризующиеся экстренными условиями эксплуатации. Все датчики давления в той или иной степени критичны к воздействию температур и виброускорений. Датчики давления можно размещать непосредственно на двигателе, однако при этом на датчики воздействуют широкие диапазоны температур и повышенные виброускорения, что приводит к дополнительной погрешности измерений, и в ряде случаев к разрушению упругого чувствительного элемента датчика. Вопросам влияния нестационарной температуры измеряемой среды на погрешность измерения посвящена работа [7]. В работе [8] рассмотрены вопросы повышения виброустойчивости датчиков, выбора конструкционных и функциональных материалов.

В механической системе «трубопровод – датчик давления» датчик расположен на некотором расстоянии от двигателя и соединен с ним с помощью трубопровода, что позволяет ослабить воздействие высоких температур и виброускорений. Задача состоит в получении дифференциальных уравнений, связывающих закон изменения давления рабочей среды на входе в трубопровод (на выходе из камеры сгорания двигателя) и деформацию упругого элемента датчика (расположенного на выходе из трубопровода) и предназначенных по величине деформации элемента рассчитать давление в двигателе. Совокупность некоторых моделей и методов исследования механической системы «трубопровод – датчик давления» представлена, например, в [9, 10]. В случае несжимаемости рабочей среды математические модели системы «трубопровод – датчик давления» рассматривались в работах [11–15].

В данной работе на основе предложенных моделей, описываемых системами дифференциальных уравнений, исследуется совместная динамика чувствительного элемента датчика давления и рабочей среды в трубопроводе в предположении, что среда идеальная и сжимаемая. Для описания движения рабочей среды используются линейные модели механики жидкости и газа, для описания динамики чувствительного элемента применяются линейные модели механики твердого деформируемого тела.

Математическая постановка начально-краевой задачи, соответствующей плоской модели механической системы «трубопровод-датчик давления», имеет вид

$$\varphi_{tt} = a_0^2(\varphi_{xx} + \varphi_{yy}), \quad x \in (0, l), \quad y \in (0, h), \quad (1)$$

$$\varphi_y(x, 0, t) = \varphi_y(x, h, t) = 0, \quad x \in (0, l), \quad (2)$$

$$\varphi_x(l, y, t) = \dot{w}(y, t), \quad y \in (0, h), \quad (3)$$

$$-\rho_0 \varphi_t(0, y, t) = P(y, t), \quad y \in (0, h), \quad (4)$$

$$P_0 - \rho_0 \varphi_t(l, y, t) - P_* = L(w(y, t)), \quad y \in (0, h). \quad (5)$$

*Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ и Ульяновской области (проекты №18-41-730015, №19-41-730006).

Дифференциальный (или интегро-дифференциальный) оператор $L(w(y, t))$ в уравнении (5) может быть задан по разному в зависимости от выбранной модели твердого деформируемого тела, например,

$$L(w(y, t)) = L^*(w(y, t)) \equiv m\ddot{w} + Dw'''' + Nw'' + \beta\dot{w}'''' + f(\dot{w}, w). \quad (6)$$

В (1)-(6) $\varphi(x, y, t)$ – потенциал скорости, описывающий движение сжимаемой рабочей среды в трубопроводе с прямолинейными стенками $y = 0, y = h$; $w(y, t)$ – деформация упругого элемента датчика, расположенного в конце трубопровода $x = l$; ρ_0, P_0, a_0 – плотность, давление, скорость звука, соответствующие состоянию покоя рабочей среды; $P(y, t)$ – заданный закон изменения давления рабочей среды на входе в трубопровод $x = 0$; P_* – внешнее воздействие на упругий элемент; m и D – погонная масса и изгибная жесткость упругого элемента; N – сжимающее (растягивающее) элемент усилие; β – коэффициент внутреннего демпфирования; $f(\dot{w}, w)$ – некоторая линейная или нелинейная функция, зависящая от деформации $w(y, t)$ и скорости деформации $\dot{w}(y, t)$; индексы x, y, t снизу обозначают частные производные по координатам x, y и времени t , точка сверху – частную производную по t , штрих – частную производную по y .

Уравнение (1) описывает движение идеального газа в трубопроводе; (2), (3) – условия непротекания стенок трубопровода и поверхности упругого элемента; условие (4) задает закон изменения давления на входе в трубопровод; уравнение (5) описывает динамику упругого элемента. Необходимо задать начальные условия для функций $\varphi(x, y, t)$ и $w(y, t)$, а также граничные условия для $w(y, t)$ при $y = 0, y = h$, соответствующие типу закрепления концов элемента (например, $w = w_y = 0$ для жесткого зацебления, $w = w_{yy} = 0$ для шарнирного закрепления). Таким образом, имеем связанную краевую задачу для функций $\varphi(x, y, t)$ и $w(y, t)$, которую следует дополнить начальными условиями.

Введем усредненные характеристики основных величин динамической системы

$$\begin{aligned} \Phi(x, t) &= \int_0^h \varphi(x, y, t) dy, & \xi(t) &= \int_0^h w(y, t) dy, \\ G(t) &= \int_0^h P(y, t) dy, & Q(w) &= \int_0^h L(w(y, t)) dy. \end{aligned} \quad (7)$$

Тогда, проводя в (1)-(5) интегрирование по y в пределах от 0 до h , с учетом обозначений (7) и граничных условий (2) получим

$$\Phi_{tt} - a_0^2 \Phi_{xx} = 0, \quad (8)$$

$$\Phi_x(l, t) = \dot{\xi}(t), \quad (9)$$

$$-\rho_0 \Phi_t(0, t) = G(t), \quad (10)$$

$$(P_0 - P_*)h - \rho_0 \Phi_t(l, t) = Q(w). \quad (11)$$

Пусть $w(y, t) = g(y)\theta(t)$, $w_0 = \int_0^h g(y) dy$, где функция $g(y)$ удовлетворяет граничным условиям, соответствующим типу закрепления упругого элемента. Тогда

$$\xi(t) = \theta(t) \cdot \int_0^h g(y) dy = w_0 \theta(t).$$

В линейной модели оператор (6) принимает вид

$$\mathbb{L}(w(y, t)) = m\ddot{w} + Dw'''' + Nw'' + \beta\dot{w}'''' + \alpha\dot{w} + \gamma w,$$

где α, γ – коэффициенты демпфирования и жесткости упругой связи. Тогда

$$Q(w) = m_0\ddot{\theta}(t) + \alpha_0\dot{\theta}(t) + \gamma_0\theta(t), \quad (12)$$

где

$$m_0 = m \int_0^h g(y) dy, \quad \alpha_0 = \alpha \int_0^h g(y) dy + \beta \int_0^h g''''(y) dy,$$
$$\gamma_0 = D \int_0^h g''''(y) dy + N \int_0^h g''(y) dy + \gamma \int_0^h g(y) dy.$$

Таким образом, решение задачи (1)-(5) сведено к исследованию одномерной системы (8)-(11) для функций $\Phi(x, t)$, $\theta(t)$, в которой $Q(w)$ имеет вид (12), а $\dot{\xi}(t) = w_0\dot{\theta}(t)$.

Отметим, что с помощью введения усредненных характеристик аналогичным образом к решению одномерной задачи сводятся следующие начально-краевые задачи: задача, соответствующая осесимметричной модели механической системы «трубопровод-датчик давления»; задача, соответствующая трехмерной модели системы «трубопровод-датчик давления», в которой сечение трубопровода имеет прямоугольную форму; задача, соответствующая трехмерной модели системы «трубопровод-датчик давления» в цилиндрических координатах для трубопровода с поперечным сечением в виде сектора.

Рассматривается несколько способов исследования одномерной системы (8)-(11).

1. Аналитическое исследование. Общее решение уравнения (8) имеет вид: $\Phi(x, t) = A(t - \frac{x}{a_0}) + B(t + \frac{x}{a_0})$. Подставляя это решение в (9)-(11) и проводя ряд несложных математических действий, получим уравнение с отклоняющимся аргументом, связывающее величину отклонения $\theta(t)$ чувствительного элемента датчика с законом изменения давления $G(t)$ рабочей среды в двигателе

$$m_0 \left[\ddot{\theta} \left(t - \frac{l}{a_0} \right) + \ddot{\theta} \left(t + \frac{l}{a_0} \right) \right] + \alpha_0 \left[\dot{\theta} \left(t - \frac{l}{a_0} \right) + \dot{\theta} \left(t + \frac{l}{a_0} \right) \right] +$$
$$+ \gamma_0 \left[\theta \left(t - \frac{l}{a_0} \right) + \theta \left(t + \frac{l}{a_0} \right) \right] - \rho_0 a_0 w_0 \left[\dot{\theta} \left(t - \frac{l}{a_0} \right) - \dot{\theta} \left(t + \frac{l}{a_0} \right) \right] = 2[G(t) + (P_0 - P_*)h].$$

2. Численно-аналитическое исследование с помощью метода Галеркина, при реализации которого потенциал скорости $\Phi(x, t)$ или давление $z = P_0 - \rho_0\Phi_t(x, t)$ представляется в виде отрезка ряда по полной на отрезке $[0, l]$ системе функций, удовлетворяющих однородным граничным условиям, соответствующим условиям (9), (10) или (10), (11). В результате решение сведено к решению задачи Коши для линейной системы обыкновенных дифференциальных уравнений.

3. Численное исследование проводилось также на основе метода конечных разностей, использовалась явная схема, на основе которой проведен численный эксперимент.

Литература

1. Эткин Л. Г. Виброаппаратные датчики. Теория и практика. М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2004. 408 с.
2. Казарян А. А., Грошев Г. П. Универсальный датчик давления // Измерительная техника. 2008. № 3. С. 26–30.

3. Аш Ж. и соавторы. Датчики измерительных систем: В 2-х книгах. Пер. с франц. М.: Мир, 1992.
4. Агейкин Д. И., Костина Е. Н., Кузнецова Н. Н. Датчики контроля и регулирования. М.: Машиностроение, 1965. 928 с.
5. Корсунов В. П. Упругие чувствительные элементы. Саратов: Изд-во Саратовского ун-та, 1980. 264 с.
6. Андреева Л. Е. Упругие элементы приборов. 2-е издание. М.: Машиностроение, 1981. 392 с.
7. Белозубов Е. М., Мокров Е. А., Тихомиров Д. В. Минимизация погрешности тонкопленочных тензорезисторных датчиков давления при воздействии нестационарной температуры // Датчики и системы. 2004. № 1. С. 26-29.
8. Мокров Е. А., Лебедев Д. В., Базаев В. П., Ефремов Е. В., Семина И. А., Колчин П. А. О конструктивно-технологическом совершенствовании тензорезисторных тонкопленочных датчиков давлений // Датчики и системы. 2008. № 6. С. 2-7.
9. Анкилов А. В., Вельмисов П. А., Горбоконенко В. Д., Покладова Ю. В. Математическое моделирование механической системы «трубопровод - датчик давления». Ульяновск: УлГТУ, 2008. 188 с.
10. Вельмисов П. А., Покладова Ю. В. Исследование динамики деформируемых элементов некоторых аэрогидроупругих систем // Ульяновск: УлГТУ. 2018. 152 с.
11. Вельмисов П. А., Горбоконенко В. Д., Решетников Ю. А. Математическая модель системы «трубопровод – датчик давления» // Механика и процессы управления: сборник научных трудов. Ульяновск: УлГТУ, 2002. С. 9-15.
12. Вельмисов П. А., Горбоконенко В. Д., Решетников Ю. А. Математическое моделирование механической системы «трубопровод – датчик давления» // Датчики и системы. 2003. № 6(49). С. 12–15.
13. Вельмисов П. А., Покладова Ю. В., Серебрянникова Е. С. Математическое моделирование системы «трубопровод - датчик давления» // Журнал Средневолжского математического общества. 2010. Т. 12, № 4. С. 85–93.
14. Velmisov P. A., Pokladova Yu. V. Mathematical modelling of the “pipeline – pressure sensor” system // Journal of Physics: Conference Series, 2019. Vol. 1353, 012085, pp. 1-6; doi: 10.1088/1742-6596/1353/1/012085.
15. Velmisov P. A., Pokladova Yu. V., Mizher U. J. Mathematical modelling of the mechanical system “pipeline – pressure sensor” // AIP Conference Proceedings 2172, 030006 (2019); doi: 10.1063/1.5133495.

MSC2020 35Q35, 35Q74, 65M06

Investigation of dynamic processes in pressure measurement systems for gas-liquid media

Yu. A. Tamarova, P. A. Velmisov, N. D. Aleksanin, N. I. Nurullin
Ulyanovsk state technical university

УДК 517.938

Исследование модели реализации алгоритма квантового распределения ключей в турбулентной атмосфере*

Фалеева М. П., Попов И. Ю.

Национальный исследовательский университет ИТМО

1. Введение

На сегодняшний день огромный интерес представляют исследования, связанные с разработкой линий связи, в основе которых лежат квантовые свойства света [1]- [2]. Безусловным преимуществом таких линий связи является высокая степень секретности передаваемой информации. Создание же квантовых каналов в свободном пространстве позволит решить вопрос передачи квантовой информации на расстояния, сравнимые с межконтинентальными, чего не позволяют достичь оптоволоконные каналы из-за сильного затухания сигналов [3]- [5]. Однако в настоящий момент накопленный материал в области изучения влияния турбулентной атмосферы на квантовую запутанность и осуществление квантовых алгоритмов далек до возможности реализации систем глобальной квантовой коммуникации.

2. Основное содержание работы

Построение математической модели открытого квантового канала в турбулентной атмосфере является достаточно сложной задачей. Турбулентность определяется совокупностью различных явлений атмосферы, таких как блуждание лучей, расширение лучей, сцинтилляция и декогерентность, которые порождают различные колебания атмосферных характеристик и случайные изменения параметров распространения электромагнитных волн. Мы рассмотрим только одно из явлений, явление блуждающего луча, которое порождает отклонение в начальном направлении распространения луча. Эффект блуждающего луча характерен для атмосферы со слабой турбулентностью, где он является преобладающим [6]. Изучим влияние данного эффекта на распространение света, который генерируется источником в виде гауссова пучка и отправляется на приемник. Вследствие турбулентности, пятно луча, падающего на круглую апертуру приемника, будет смещено относительно самой апертуры, и часть света не попадет на измерительную аппаратуру. Прошедший свет будет характеризоваться коэффициентом пропускания, который является случайной величиной, что вызвано случайной природой турбулентности. Для реализации кубитов мы используем моды гауссова пучка света:

$$\begin{aligned} \Psi_{mn}(x, y, z_{ap}, k) = \\ \sqrt{\frac{2}{\pi W^2}} \exp\left(-\left((x-r)^2 + y^2\right)\left(\frac{1}{W^2} + \frac{ik}{2R}\right) + i(1+m+n)\phi\right) \\ H_m\left(\frac{\sqrt{2}(x-r)}{W}\right) H_n\left(\frac{\sqrt{2}y}{W}\right), \end{aligned} \quad (1)$$

*Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 19-31-90154

которые являются решениями параксиального уравнения Гельмгольца:

$$\left(i \frac{\partial}{\partial z} + \frac{1}{2k} \Delta_{\perp} + kn_1(x, y, z) \right) \Psi_{in/out}(x, y, z; k) = 0, \quad (2)$$

где $\Delta_{\perp} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}$, $W(z)$ - ширина пучка на расстоянии z , $R(z)$ - радиус кривизны волнового фронта, $\phi(z_{ap})$ - фаза Гуи, z_{ap} - координата плоскости апертуры по оси Z , $H_m(\xi)$ - функции Эрмита-Гаусса. r - расстояние отклонения луча от центра апертуры. r является случайным параметром, распределение которого хорошо приближает распределения вероятностей Райса для случая слабой турбулентности.

Мы изучаем протокол квантового распределения ключей, основанный на запутанных парах кубитов (EPR-Protocol). Квантовое запутанное состояние (EPR-пара) генерируется источником. Далее каждый кубит отправляется через атмосферу по отдельному каналу получателям Алисе и Бобу и попадает на измерительную аппаратуру, состоящую из четырех идеальных детекторов в каждом канале, соответствующих измерению кубита в одном из двух базисов, состояния которых в совокупности неортогональны. После измерения Алиса и Боб связываются по классическому каналу и сравнивают базисы, в которых были измерены кубиты. Результаты, измеренные в разных базисах, отбрасывают, остальные формируют квантовый ключ. В результате передачи кубитов через турбулентную атмосферу возможно появление ошибок, в случае, когда и Алиса, и Боб получают одинаковое значение бита. Вероятность появления таких ошибок была рассчитана, и она задается следующим выражением:

$$P_{err} = \frac{1}{4} \left(\frac{T_{m_1 n_1}^2 T_{m_4 n_4}^2 - 2T_{m_1 n_1} T_{m_2 n_2} T_{m_3 n_3} T_{m_4 n_4} + T_{m_2 n_2}^2 T_{m_3 n_3}^2}{T_{m_1 n_1}^2 T_{m_4 n_4}^2 + T_{m_2 n_2}^2 T_{m_3 n_3}^2} \right), \quad (3)$$

где

$$\begin{aligned} T_{m,n}^2(r) &\approx \int_A |\Psi_{m,n}(\rho, \phi, z_{ap}; k_0)|^2 d\rho d\phi = \\ &= \frac{2}{\pi W^2} \exp\left(-\frac{2r^2}{W^2}\right) \int_0^a \rho \exp\left(-\frac{2\rho^2}{W^2}\right) \int_0^{2\pi} \exp\left(\frac{4\pi\rho \cos\phi}{W^2}\right) H_m^2\left(\frac{\sqrt{2}(\rho \cos\phi - r)}{W}\right) H_n^2\left(\frac{\sqrt{2}\rho \sin\phi}{W}\right) d\phi d\rho, \end{aligned}$$

A - открытая область апертуры, a - радиус апертуры.

Значения вероятностей (3) были рассчитаны численно для разных наборов мод, кодирующих кубиты. Турбулентность атмосферы учтена путем генерации случайных значений расстояния отклонения луча. Выявлено, что правильный выбор мод, кодирующих кубиты, позволяет снизить вероятность ошибки до минимума (например, моды $\Psi_{31}, \Psi_{32}, \Psi_{45}, \Psi_{64}$). В результате проведенного дополнительного исследования установлено, что такой набор мод также обеспечивает практически максимальное сохранение степени запутанности кубитов при передаче их через атмосферу на дальние расстояния, что указывает на важность контроля над изменением степени запутанности кубитов в процессе их передачи.

Литература

1. Nielsen M. A., Chuang I. L. Quantum Computation and Quantum Information. Cambridge University Press, 2010. 676 p.
2. Mitschke F. Fiber Optics: Physics and Technology. Springer, Berlin, 2009. 301 p.
3. Zhang Sh., Shi J., Zhao J., Zhang H., Bao W. Entanglement performance of light through the composite free space channel // Optical and quantum electronics. 2021. Vol. 53. No. 2. pp. 81.

4. Vilmrotter V., Lau C.-W. Quantum detection theory for the free-space channel // IPN Progress Report. Vol. 142. pp. 146.
5. Agrawal G.P., Fiber optics and optical communications. New Jersey: John Wiley and Sons, 2020. 626 p.
6. Vasylyev D. Yu., Semenov A. A., Vogel W. Toward global quantum communication: beam wandering preserves nonclassicality // Phys. Rev. Lett. 2012. Vol. 108. pp. 220501.

MSC2020 81P70

Analysis of the quantum key distribution algorithm implementation model in turbulent atmosphere

M. P. Faleeva, I. Yu. Popov

ITMO University

УДК 004.942

Численный анализ жестких систем дифференциальных уравнений в химической кинетике*

Фасхутдинова Р. И.

Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН

Объектом исследования является реакторный блок установки каталитической изомеризации пентан-гексановой фракции, состоящий из каскада трех реакторов. Сырьем данной установки является гидроочищенная бензиновая фракция, в качестве катализатора процесса применяют бифункциональный катализатор отечественного производства марки СИ-2 [1]. На основе имеющихся исходных данных составлена схема химических превращений, учитывающая детальное образование побочных продуктов в ходе реакций гидрокрекинга. Схема разработана на основе решения обратной задачи химической кинетики с использованием численных методов решения жестких систем обыкновенных нелинейных дифференциальных уравнений (СОНДУ) – математического описания изменения концентраций, участвующих в реакциях веществ (прямая задача).

При решении системы дифференциальных уравнений возникли трудности, связанные с неустойчивостью счета. Поэтому был проведен численный анализ прямой кинетической задачи на жесткость. Была построена матрица Якоби, для которой были рассчитаны собственные значения. В ходе исследования была установлена жесткость рассматриваемой СОНДУ на основе нескольких математических определений жесткости [2-4]. При решении обратных задач химической кинетики часто возникают ситуации, когда константы скоростей реакции принимают значения, отличные друг от друга на несколько порядков. Стандартные явные численные методы зачастую не справляются с интегрированием таких систем и в настоящее время остро стоит вопрос исследования методов, способных эффективно решать жесткие задачи. Поэтому в среде ПО MATLAB в ходе работы было произведено сравнение пяти методов *ode*, в числе которых были методы, зарекомендовавшие себя эффективными для решения жестких систем. Среди них неявные методы — одноитерационный метод Розенброка 2-го порядка точности и многошаговый метод переменного порядка.

Результаты проведенных вычислительных экспериментов на основе выбранных эффективных численных методов показали высокую адекватность. Данные промышленной установки были описаны с высокой точностью. Предложенная методика может быть опробована для решения других задач химической кинетики, для решения которых требовались большие вычислительные ресурсы и раскрывает возможности для использования технологии параллельных вычислений при решении прямых и обратных задач при исследовании сложных механизмов промышленных технологических процессов [5-7].

Литература

1. Фасхутдинов А.Г., Ахметов И.В., Губайдуллин И.М., Мусина А.Е. Математическое моделирование процесса каталитической изомеризации пентан-гексановой фракции // Вестник Башкирского университета. 2018. Т. 23. № 3. С. 739-744.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ N 20-31-90094

2. Хайер Э., Ваннер Г. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Жесткие и дифференциально-алгебраические задачи. М.: Наука, 1999. 685 с.
3. Тихонова М. В., Губайдуллин И. М., Спивак С. И. Численное решение прямой кинетической задачи методами Розенброка и Мишельсена для жестких систем дифференциальных уравнений // Журнал средневожского математического общества. 2010. Т. 12, № 2. С. 26–32.
4. Каханер Д., Моулер К., Нэш С. Численные методы и программное обеспечение. – М.: Мир, 1998. 575 с.
5. Nurislamova L.F., Gubaydullin I.M., Koledina K.F., Safin R.R. Kinetic model of the catalytic hydroalumination of olefins with organoaluminum compounds // Reaction Kinetics, Mechanisms and Catalysis. 2016. Vol. 117. № 1. pp. 1-14.
6. Усков С.И., Еникеева Л.В., Потемкин Д.И., Беляев В.Д., Снытников П.В., Губайдуллин И.М., Кириллов В.А., Собянин В.А. Кинетика мягкого парового риформинга пропана в избытке метана на Ni-содержащем катализаторе // Катализ в промышленности. 2017. № 1. С. 11-17.
7. Линд Ю.Б., Губайдуллин И.М., Мулюков Р.А. Методология параллельных вычислений для решения задач химической кинетики и буровой технологии // Системы управления и информационные технологии. 2009. № 2 (36). С. 44-49.

MSC2020 49K15

Numerical analysis of stiff systems of differential equations in chemical kinetics

R. I. Faskhutdinova

Institute of Petrochemistry and Catalysis of the Russian Academy of Sciences

УДК 515.162.2

Нахождение полных характеристик периодических автоморфизмов двумерного тора*

Чилина Е. Е.

Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»

Пусть S – замкнутая ориентируемая поверхность. Гомеоморфизмы $f, f' : S \rightarrow S$ называются *топологически сопряженными*, если существует гомеоморфизм $h : S \rightarrow S$ такой, что $f' = h \circ f \circ h^{-1}$.

Отличный от тождественного гомеоморфизм f называется *периодическим*, если существует такое $n \in \mathbb{N}$, что $f^n = id$. Наименьшее из таких n называется периодом f .

В силу результатов Я. Нильсена [3] для любого сохраняющего ориентацию периодического преобразования f периода n замкнутой ориентируемой поверхности S верны следующие утверждения:

1. Каждому f сопоставляется множество $\bar{B} \subset S$ *периодических точек гомеоморфизма f , период которых строго меньше n* . Это множество либо пусто, либо состоит из конечного числа орбит $\mathcal{O}_1, \dots, \mathcal{O}_k$, $k \geq 1$, периода n_i , $i \in \{1, \dots, k\}$, являющегося делителем n . Положим $\lambda_i = \frac{n}{n_i}$. Для каждой орбиты $\mathcal{O}_i \subset \bar{B}$ существует единственное взаимно простое с λ_i число $\delta_i \in \{1, \dots, \lambda_i - 1\}$ такое, что в некоторой окрестности $D_{\bar{x}_i}$ точки $\bar{x}_i \in \mathcal{O}_i$ гомеоморфизм f^{n_i} топологически сопряжен с поворотом комплексной плоскости вокруг начала координат:

$$z \rightarrow e^{\frac{2\pi\delta_i}{\lambda_i} \mathbf{i}} z. \quad (1)$$

2. Для любого δ_i существует число $d_i \in \{1, \dots, \lambda_i - 1\}$ такое, что $d_i \delta_i \equiv 1 \pmod{\lambda_i}$. В силу сопряженности с отображением (1) существует кривая, гомеоморфная окружности, которая инвариантна относительно гомеоморфизма f^{n_i} . Тогда число d_i обладает следующим свойством: дуга, принадлежащая инвариантной окружности, рассматриваемая в направлении против часовой стрелки и заключенная между точками \bar{x} и $f^{n_i d_i}(\bar{x})$, не содержит точек орбиты точки \bar{x} , отличных от точек \bar{x} и $f^{n_i d_i}(\bar{x})$.

Для каждого периодического преобразования f поверхности S определим набор чисел

$$(n, p, n_1, \dots, n_k, d_1, \dots, d_k),$$

который обозначим через κ и будем называть *полной характеристикой* периодического преобразования f .

Из работ Керкьярто [1], Брауэра [2] и Нильсена [3] следует

Предложение 1. *Два периодических преобразования f и f' поверхности S топологически сопряжены с помощью сохраняющего ориентацию гомеоморфизма тогда и только тогда, когда их полные характеристики совпадают.*

* Публикация подготовлена в ходе проведения исследования (№ 21-04-004) в рамках Программы «Научный фонд Национального исследовательского университета «Высшая школа экономики» (НИУ ВШЭ)» в 2021-2022 гг.

Пусть $A = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$ – унимодулярная целочисленная матрица. Тогда она индуцирует отображение $f_A : \mathbb{T}^2 \rightarrow \mathbb{T}^2$, заданное формулой

$$f_A : \begin{cases} \bar{x} = ax + by \pmod{1} \\ \bar{y} = cx + dy \pmod{1} \end{cases},$$

которое является алгебраическим автоморфизмом двумерного тора. При этом, если собственные значения матрицы A не равны по модулю единице, то алгебраический автоморфизм двумерного тора, заданный матрицей A , называется гиперболическим алгебраическим автоморфизмом двумерного тора. В противном случае алгебраический автоморфизм двумерного тора, заданный матрицей A , будем называть негиперболическим алгебраическим автоморфизмом двумерного тора.

Из результатов Баттерсона [4] следует

Утверждение 1. *Каждый класс сопряженности негиперболических алгебраических автоморфизмов двумерного тора задан в точности одной из следующих матриц*

$$M_1(m) = \begin{pmatrix} 1 & m \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, M_2(m) = \begin{pmatrix} -1 & m \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, M_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, M_4 = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

$$M_5 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}, M_6 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & -1 \end{pmatrix}, M_7 = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}, m \in \{0, 1, 2, \dots\}.$$

Следствие 1. *Существует 6 классов периодических алгебраических автоморфизмов двумерного тора, каждый из которых задан в точности одной из следующих матриц:*

$$M_2(0) = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, M_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, M_4 = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

$$M_5 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}, M_6 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & -1 \end{pmatrix}, M_7 = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}.$$

При этом матрицы $M_2(0), M_5, M_6, M_7$ индуцируют сохраняющие ориентацию периодические автоморфизмы двумерного тора, а матрицы M_3, M_4 индуцируют не сохраняющие ориентацию периодические автоморфизмы двумерного тора.

Введём следующий набор матриц: $A_1 = M_2(0), A_2 = M_6^{-1}, A_3 = M_6, A_4 = M_7, A_5 = M_7^{-1}, A_6 = M_5^{-1}, A_7 = M_5$.

Обозначим через κ_j полную характеристику отображения f_{A_j} .

Теорема 1. *Существует в точности семь классов топологической сопряженности посредством сохраняющего ориентацию гомеоморфизма периодических автоморфизмов двумерного тора, каждый из которых задаётся автоморфизмом f_{A_j} ($j = \overline{1, 7}$), индуцированным матрицей A_j :*

$$A_1 = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}; A_2 = \begin{pmatrix} -1 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; A_3 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & -1 \end{pmatrix}; A_4 = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix};$$
$$A_5 = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}; A_6 = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; A_7 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}.$$

При этом каждому f_{A_j} соответствует полная характеристика κ_j следующего вида:

1. $\kappa_1: n = 2, p = 1, k = 4, n_1 = n_2 = n_3 = n_4 = 1, d_1 = d_2 = d_3 = d_4 = 1;$
2. $\kappa_2: n = 3, p = 1, k = 3, n_1 = n_2 = n_3 = 1, d_1 = d_2 = d_3 = 1;$
3. $\kappa_3: n = 3, p = 1, k = 3, n_1 = n_2 = n_3 = 1, d_1 = d_2 = d_3 = 2;$
4. $\kappa_4: n = 6, p = 1, k = 3, n_1 = 3, n_2 = 2, n_3 = 1, d_1 = d_2 = d_3 = 1;$
5. $\kappa_5: n = 6, p = 1, k = 3, n_1 = 3, n_2 = 2, n_3 = 1, d_1 = 1, d_2 = 2, d_3 = 5;$
6. $\kappa_6: n = 4, p = 1, k = 3, n_1 = 2, n_2 = n_3 = 1, d_1 = d_2 = d_3 = 1;$
7. $\kappa_7: n = 4, p = 1, k = 3, n_1 = 2, n_2 = n_3 = 1, d_1 = 1, d_2 = d_3 = 3.$

Автор благодарит В. З. Гринеса и О. В. Починку за постановку задачи и полезные обсуждения.

Литература

1. B. von Kerekjarto. Topologische Charakterisierung der linearen Abbildungen. Acta Scient. Math. Szeged, 1934. Vol. 6, pp. 235–262.
2. Brouwer L. E. J. Aufzählung der periodischen Transformationen, in: KNAW, Proceedings, 21 II, 1919, Amsterdam, 1919. pp. 1352-1356.
3. Nielsen J. Die struktur periodischer transformationen von flachen. Math.-fys. Medd. Danske Vid. Selsk. 1937. Vol. 15, No. 1, pp. 65–102.
4. Batterson S. The dynamics of Morse-Smale diffeomorphisms on the torus. Transactions of the American Mathematical Society. 1979. Vol. 256. pp. 395-403.

MSC2020 37E30

Finding complete characteristics of periodic automorphisms of the two-dimensional torus.

E. E. Chilina
HSE University

УДК 517.9

К вопросу о периодических решениях линейных неоднородных дифференциальных уравнений с двумя малыми параметрами

Шаманаев П.А.

Национальный исследовательский Мордовский государственный университет
им. Н.П. Огарева

Задача о существовании периодических решений дифференциальных уравнений с одним малым параметром с помощью метода Ляпунова-Шмидта рассматривалась во многих работах [1–4]. В основе этого подхода лежит понятие обобщенного жорданового набора, введенного в работе [5].

В настоящей работе решается задача о нахождении периодических решений линейных неоднородных дифференциальных уравнений с возмущением в виде двух малых линейных слагаемых на основе обобщенного жорданового набора в смысле работы [6].

Пусть E_1, E_2 — банаховы пространства. Рассмотрим линейное неоднородное дифференциальное уравнение

$$A \frac{dx}{dt} = (B_0 - \varepsilon_1 B_1 - \varepsilon_2 B_2) x - f(t), \quad (1)$$

где $x \in E_1$; A, B_0, B_1 и B_2 — плотно заданные линейные фредгольмовы операторы, действующие из E_1 в E_2 ; $f \in E_2$, $f(t+T) = f(t)$, $T > 0$; $\varepsilon_1, \varepsilon_2$ — малые вещественные параметры; A — вырожденный или тождественный оператор.

Ставится задача: при достаточно малых вещественных ε_1 и ε_2 найти все T -периодические решения $x(t, \varepsilon_1, \varepsilon_2)$ уравнения (1), удовлетворяющие условию $x(t, 0, 0) = z(t)$, где $z(t)$ — T -периодическое решение уравнения

$$A \frac{dz}{dt} = B_0 z - f(t). \quad (2)$$

Для решения поставленной задачи используется модифицированный метод Ляпунова-Шмидта, основанный на представлении дифференциального уравнения (1) в виде некоторого операторного уравнения. Предполагая, что оператор-функция, входящая в операторное уравнение, имеет обобщенный жорданов набор в смысле работы [6], операторное уравнение сводится к исследованию разрешающей системы Ляпунова-Шмидта в корневом подпространстве [7]. При условии полноты обобщенного жорданового набора показывается, что разрешающая система, представляющая собой систему линейных алгебраических уравнений, при достаточно малых ε_1 и ε_2 имеет единственное решение, а при $\varepsilon_1 = 0$ и $\varepsilon_2 = 0$ — семейство n -параметрических решений.

Далее показано, что уравнение (1) при условии, что точка $(\varepsilon_1, \varepsilon_2)$ принадлежит достаточно малой выколотой окрестности нуля, имеет единственное T -периодическое аналитическое по ε_1 и ε_2 решение. Причем, при $\varepsilon_1 = 0$ и $\varepsilon_2 = 0$ решение уравнения (1) переходит в n -параметрическое семейство T -периодических решений уравнения (2).

Если длины сторон всех обобщенных жордановых сеток равны единицы, то уравнение (1) имеет единственное T -периодическое решение, являющееся аналитическим по ε_1 и ε_2 из достаточно малой окрестности нуля. Причем решение возмущенного уравнения (1) стремится к решению невозмущенного уравнения (2) при стремящихся к нулю ε_1 и ε_2 .

Если существует хотя бы одна обобщенная жорданова сетка, длина стороны которой больше единицы, то решение уравнения (1) имеет полюс в нулевой точке либо по ε_1 , либо по ε_2 , либо по ε_1 и ε_2 одновременно.

Литература

1. Sidorov N.A., Loginov B.V., Sinitsyn A., Falaleev M. Lyapounov-Schmidt methods in nonlinear analysis and applications. Kluwer Academic Publishers, 2002, 548 p.
2. Коноплёва И.В., Логинов Б.В., Русак Ю.Б. Симметрия и потенциальность уравнений разветвления в корневых подпространствах в неявно заданных стационарных и динамических бифуркационных задачах. Изв. высших учеб. заведений. Сев.-Кавказ. регион. Естественные науки. 2009. Спецвыпуск. С. 115-124.
3. Кяшкин А. А., Логинов Б. В., Шаманаев П. А. Комментарии к задачам о возмущениях линейного уравнения малым линейным слагаемым и спектральных характеристик фредгольмова оператора // Журнал Средневожского математического общества. 2013. Т. 15, № 3. С. 100-107.
4. Кяшкин А. А., Логинов Б. В., Шаманаев П. А. О ветвлении периодических решений линейных неоднородных дифференциальных уравнений с вырожденным или тождественным оператором при производной и возмущением в виде малого линейного слагаемого // Журнал Средневожского математического общества. 2016. Т. 18, № 1. С. 45-53.
5. Вайнберг М. М., Треногин В. А. Теория ветвления решений нелинейных уравнений. М.: Наука, 1969. 528 с.
6. Шаманаев П. А. О некоторых обобщениях жордановых наборов линейных оператор-функций, зависящих от двух малых параметров [Электронный ресурс] // Диф. ур. и их прил. в матем. модел.: материалы XIII Межд. научн. конф. (Саранск, 12-16 июля 2017 г.). - Саранск: СВМО, 2017. - С. 511-516. Режим доступа: <http://conf.svmo.ru/files/deamm2017/papers/paper69.pdf>.
7. Шаманаев П. А. К вопросу о возмущении линейного уравнения двумя малыми линейными слагаемыми [Электронный ресурс] // Диф. ур. и их прил. в матем. модел.: материалы XIV Межд. научн. конф. (Саранск, 9-12 июля 2019 г.). - Саранск: СВМО, 2019. - С. 92-94. Режим доступа: <http://conf.svmo.ru/files/2019/papers/paper28.pdf>.

MSC2020 34G10

On the question of periodic solutions of linear inhomogeneous differential equations with two small parameters

P. A. Shamanaev

National Research Mordovia State University

УДК 519.7

Математическое моделирование процесса воздействия цифровой среды на молодежь

Яшин Е. Е., Мамедова Т. Ф., Кирдяшова Е. В.

Национальный исследовательский Мордовский государственный университет

В последние годы значительно увеличивается негативное воздействие на молодежь со стороны различных социальных сетей. В январе 2019 года экспертами ВЦИОМ был проведен опрос среди взрослых и подростков (14–17 лет) на тему влияния социальных сетей на их поведение. В основном респонденты утверждали, что находили в сети положительный контент. Однако 28% подростков сообщили, что видели сцены насилия, 16% – пропаганду наркотиков, 19% – призывы к самоубийствам. При этом подростки отмечали, что их интерес к «плохим» группам сформирован не самими соцсетями, а реальными предпосылками: 49% подростков считали, что такой интерес вызван психологическими проблемами, 31% – конфликтами со сверстниками, 29% – отсутствием родительского контроля. На современном этапе в деструктивные течения в Интернете вовлечены порядка 5 миллионов аккаунтов российских подростков (35% от общего числа подростков в России), и это число продолжает расти [1].

Определим цифровую гигиену как формирование активной позиции обучающихся в получении знаний и умений выявлять информационную угрозу, определять степень ее опасности.

Формирование цифровой гигиены является важной составляющей работы с молодежью, активно использующей различные сетевые формы общения (социальные сети, игры, пр.).

Будем считать, что создание системы управления факторами воздействия цифровой среды на молодежь возможно при формировании общекультурных навыков работы с информацией. Для более детального исследования данной проблемы используем модель «хищник-жертва», описывающую динамику потребления пользователями негативных социальных медиа в ограниченной среде (на одной Интернет-платформе). В динамике популяций часто исследуется взаимодействие хищников (в нашем случае социальных медиа) и их добычи (пользователей этих социальных медиа) при всевозможных достаточно общих предположениях.

Введем следующие обозначения. Жертвы $x(t)$ – это количество пользователей, просматривающих социальные медиа в момент времени t . Хищники $y(t)$ – это количество социальных медиа (контента) в момент времени t . Тогда число пользователей, которые просматривают социальные медиа за единицу времени будет определяться из соотношения $A = ax$, где $a > 0$ – скорость увеличения пользователей в социальных медиа в отсутствие увеличения количества самих социальных медиа.

Пусть $B = by$, тогда B – сокращение количества социальных медиа за единицу времени. Количественный показатель перехода пользователя из статуса «нормальный» в статус «зараженный» отрицательными социальными медиа будет определяться уравнением $Bx = byx$, где b – коэффициент перехода пользователя в статус «зараженный» негативными социальными медиа. c – естественное снижение уровня социальных медиа (снижение популярности и просмотров), если пользователи отсутствуют ($c > 0$). d – коэффициент перехода пользователя в статус «зараженный» негативным социальным медиа с учетом популярности социального медиа.

Тогда для описания исследуемого процесса подходит следующая математическая модель [2]:

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = ax - byx, \\ \frac{dy}{dt} = -cy + dxy. \end{cases}$$

На основе полученной модели был разработан алгоритм выявления факторов воздействия цифровой среды на молодежь с учетом наиболее распространенных и устоявшихся общественных норм поведения, а также с учетом понятия цифровой гигиены.

Проведена численная реализация разработанного алгоритма. Получены количественные результаты, с помощью которых были обнаружены признаки намеренного распространения деструктивной информации с целью провокации деструктивного поведения молодежи на одной определенной Интернет-платформе.

Применение разработанной методики моделирования на данном этапе показало, что эта проблема требует дальнейшего тщательного исследования. Планируется проведение автоматизированного и полуавтоматизированного исследования контента социальных сетей с октября 2021 г. по март 2022 г. на всем объеме информации социальных медиа с целью повышения цифровой гигиены молодежи.

Литература

1. Прокофьев О. В., Сёмочкина И. Ю. Компетенции цифровой гигиены в высшем техническом образовании // Современные информационные технологии. Пенза. 2019. № 29. С. 83–87.
2. Мамедова Т. Ф., Ляпина А. А. Алгоритм исследования моделей нелинейной динамики // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. 2013. № 3 (27). С. 48-57.

MSC2020 91P10

Mathematical modeling of the process of impact of the digital environment on young people

E. E. Yashin, T. F. Mamedova, E. V. Kirdyashova
National Research Ogarev Mordovia State University

УДК 517.962.2

Корректность метода линеаризации дискретной системы в одном критическом случае

Афиногентова Е. В.

Национальный исследовательский Мордовский государственный университет

Аннотация: Метод линеаризации широко используется для исследования нелинейных моделей. В статье рассматривается вопрос корректности такого метода в случае дискретной системы, для которой вопрос об устойчивости не решается линейным приближением, т. е. имеет место критический случай. Предложен способ получения оценки отклонения решения нелинейной системы от ее линеаризованного варианта в критическом случае одного единичного корня.

Ключевые слова: дискретная система, устойчивость, критический случай.

1. Введение

Пусть дискретный процесс описывается системой конечно-разностных уравнений вида

$$\begin{cases} y(k+1) = y(k) + \lambda y^m(k) + p(k) + f(y(k), z(k)), & y(0) = y_0, \\ z(k+1) = Az(k) + q(k) + g(y(k), z(k)), & z(0) = z_0, \end{cases} \quad (1)$$

$k = 0, 1, 2, \dots$

Будем рассматривать систему (1) в области

$$D = \{(y, z) : y \in \mathbf{R}, z \in \mathbf{R}^n, |y(k)| \leq \delta_1, \|z(k)\| \leq \delta_2\},$$

где $\delta_1 > 0, \delta_2 > 0$, f, p — скалярные функции, g, q — векторные функции размерности n , удовлетворяющие условиям

$$|f(y, z)| \leq \alpha |y|^{m+1}, \|g(y, z)\| \leq \beta (\|z\|^h + |y|^{m+1}),$$

$$m > 2, h \geq 2, |p(k)| \leq P, \|q(k)\| \leq Q, P > 0, Q > 0.$$

Здесь $\|\cdot\|$ — норма евклидова. Предполагается, что A — постоянная матрица размерности $n \times n$, модули всех собственных значений которой меньше единицы. Пусть $\lambda < 0$, m — нечетное число. Это гарантирует асимптотическую устойчивость нулевого решения «укороченного» уравнения [1]

$$y(k+1) = y(k) + \lambda y^m(k) + f(y(k), 0). \quad (2)$$

В силу сделанных относительно матрицы A предположений линейная система

$$\tilde{z}(k+1) = A\tilde{z}(k), \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (3)$$

асимптотически устойчива. Тогда [2] для нее существует определенно положительная функция Ляпунова $W(\tilde{z}(k))$ такая, что:

- а) $\|\tilde{z}\| \leq W(\tilde{z}) \leq M\|\tilde{z}\|$, $M \geq 1$;
 б) $|W(\tilde{z}''') - W(\tilde{z}')| \leq M\|\tilde{z}''' - \tilde{z}'\|$;
 в) $W(A\tilde{z}(k)) - W(\tilde{z}(k)) \leq -\chi W(\tilde{z}(k))$, $0 < \chi < 1$.

На множестве D рассмотрим систему следующего вида

$$\begin{cases} \bar{y}(k+1) = \bar{y}(k) + \lambda \bar{y}^m(k) + p(k), & \bar{y}(0) = y_0, \\ \bar{z}(k+1) = A\bar{z}(k) + q(k), & \bar{z}(0) = z_0 \end{cases}, \quad (4)$$

$$k = 0, 1, 2, \dots$$

Будем называть ее «линеаризованной». Цель работы — оценить отклонение решений системы (1) от решений системы (4). Введем обозначение.

$$\varepsilon(k) = y(k) - \bar{y}(k), \quad \xi(k) = z(k) - \bar{z}(k).$$

Далее в работе будут получены оценки для $\varepsilon(k)$ и $\xi(k)$, $k = 0, 1, 2, \dots$.

2. Основные результаты

На основе разностного аналога второго метода Ляпунова [2] и дискретной теоремы сравнения [3] получим оценки на решения системы (1).

Рассмотрим первые разности функций $V(y(k)) = y^2(k)$ и W на решениях системы (1)

$$\begin{cases} V(y(k+1)) - V(y(k)) & \leq 2\lambda V^{(m+1)/2}(y(k)) + 2\delta_1(\alpha V^{(m+1)/2}(y(k)) + \\ & + P) + \lambda^2 V^m(y(k)), \\ W(z(k+1)) - W(z(k)) & \leq -\chi W(z(k)) + M(Q + \beta(W^h(z(k)) + \\ & + |y^{m+1}(k)|)), \end{cases} \quad (5)$$

$$k = 0, 1, 2, \dots$$

Если потребовать выполнения условия $-\frac{1}{2} - \delta_1\alpha < \lambda < -\delta_1\alpha$, то к первому неравенству системы (5) применима теорема сравнения [3]: $V(y(k)) \leq v_k$, где v_k — решение уравнения

$$v_{k+1} - v_k = 2\lambda v_k^{(m+1)/2} + 2\delta_1(\alpha v_k^{(m+1)/2} + P) + \lambda^2 v_k^m, \quad v_0 = y_0^2$$

$$k = 0, 1, 2, \dots \quad (6)$$

В области $u \geq 0$ рассмотрим функцию

$$\varphi(u) = 2\lambda u^{(m+1)/2} + 2\delta_1(\alpha u^{(m+1)/2} + P) + \lambda^2 u^m.$$

Уравнение $\varphi(u) = 0$ может иметь не более двух решений. Пусть $u^{(1)}$ и $u^{(2)}$ — решения этого уравнения, при этом $0 < u^{(1)} \leq u^{(2)}$. Тогда очевидно, что $u^{(1)}$ — устойчивое, а $u^{(2)}$ — неустойчивое положения равновесия уравнения (6). Если $|y_0| \leq \sqrt{u^{(2)}}$, то при всех $k = 0, 1, 2, \dots$

$$|y(k)| \leq \max\{|y_0|, \sqrt{u^{(1)}}\} \equiv \Delta_1. \quad (7)$$

Применяя оценку (7) ко второму неравенству системы (5), имеем

$$W(z(k+1)) - W(z(k)) \leq -\chi W(z(k)) + M(Q + \beta(W^h(z(k)) + \Delta_1^{m+1})).$$

Так как $1 - \chi > 0$, то для $W(z(k))$ также применима теорема сравнения [3], согласно которой $W(z(k)) \leq w_k$, где w_k — решение уравнения

$$w_{k+1} - w_k = -\chi w_k + M(Q + \beta(w_k^h + \Delta_1^{m+1})), w_0 = W(z_0), \quad (8)$$

$$k = 0, 1, 2, \dots$$

Пусть $w^{(1)}, w^{(2)}$ — положения равновесия уравнения (8) и $0 \leq w^{(1)} \leq w^{(2)}$. Если $W(z_0) \leq w^{(2)}$, то также получаем оценку при всех $k = 0, 1, 2, \dots$

$$\|z(k)\| \leq \max\{W(z_0); w^{(1)}\} \equiv \Delta_2, \quad (9)$$

Дальнейшие рассуждения направлены на нахождение оценок уклонений $\varepsilon(k)$ и $\xi(k)$. Для них справедливы соотношения

$$\begin{cases} \varepsilon(k+1) = \varepsilon(k) + \lambda B(y(k), \bar{y}(k))\varepsilon(k) + f(y(k), z(k)), & \varepsilon(0) = 0; \\ \xi(k+1) = A\xi(k) + g(y(k), z(k)), & \xi(0) = 0; \end{cases} \quad (10)$$

$$k = 0, 1, 2, \dots$$

Здесь $B(y, \bar{y}) = y^{m-1} + y^{m-2}\bar{y} + \dots + \bar{y}^{m-1}$, $B(y, \bar{y}) \geq 0$, т. к. $m > 2$ — нечетное число. На множестве $D: B(y, \bar{y}) \leq m\delta_1^{m-1}$. За счет выбора параметра δ_1 можно добиться, чтобы система

$$\bar{\varepsilon}(k+1) = (1 + \lambda m \delta_1^{m-1})\bar{\varepsilon}(k), \quad (11)$$

$$k = 0, 1, 2, \dots$$

была асимптотически устойчива. Пусть система (11) асимптотически устойчива, тогда [2] существует функция Ляпунова \tilde{V} , удовлетворяющая условиям:

- а') $|\bar{\varepsilon}(k)| \leq \tilde{V}(\bar{\varepsilon}(k)) \leq L|\bar{\varepsilon}(k)|$, $L \geq 1$;
- б') $|\tilde{V}(\bar{\varepsilon}''(k)) - \tilde{V}(\bar{\varepsilon}'(k))| \leq L|\bar{\varepsilon}''(k) - \bar{\varepsilon}'(k)|$;
- в') $\tilde{V}(\bar{\varepsilon}(k+1)) - \tilde{V}(\bar{\varepsilon}(k)) \leq -\theta\tilde{V}(\bar{\varepsilon}(k))$, $0 < \theta < 1$.

Следуя работе [4], получим

$$|\varepsilon(k)| \leq \alpha L \Delta_1^{m+1} \frac{1 - (1 - \theta - \lambda L m \delta_1^{m-1})^k}{\theta + \lambda L m \delta_1^{m-1}} < \frac{\alpha L \Delta_1^{m+1}}{\theta + \lambda L m \delta_1^{m-1}}, \quad k = 1, 2, \dots, \quad (12)$$

при $0 < 1 - \theta - \lambda L m \delta_1^{m-1} < 1$, т. е. в достаточно малой окрестности начала отсчета.

Для получения оценки на $\xi(k)$ воспользуемся функцией W , введенной выше для системы (3)

$$W(\xi(k+1)) - W(\xi(k)) \leq -\chi W(\xi(k)) + M\beta(\Delta_2^h + \Delta_1^{m+1}). \quad (13)$$

Отсюда приходим к искомой оценке

$$\|\xi(k)\| \leq M\beta(\Delta_2^h + \Delta_1^{m+1}) \frac{1 - (1 - \chi)^k}{\chi} < \frac{M\beta(\Delta_2^h + \Delta_1^{m+1})}{\chi}, \quad k = 1, 2, \dots \quad (14)$$

Таким образом, при выполнении условий, гарантирующих асимптотическую устойчивость нулевого решения системы (1), существуют оценки (12) и (14) уклонений решений системы (1) от решений «линеаризованной» системы (4). Предложенный метод построения оценок требует наличия функций Ляпунова для линейных систем вида (3) и (11) с оценками а)–в) и а')–в'). Примеры таких функций можно встретить, например, в [5].

Литература

1. Liu Yong-qing. The necessary and sufficient conditions of stability for 1 st-order nonlinear discrete systems in the first critical case. Adv. Modell. and Simul. 1988. Vol. 14, No. 3. pp. 1-8.
2. Agarwal R. P. Difference equations and inequalities: theory, methods and applications. New York, Basel: Marcel Dekker, 2000. - 985 p.
3. Sugiyama S. Difference inequalities and their applications to stability problems. Lect. Notes Math. 1971. No. 243. pp. 1-15.
4. Афиногентова Е. В., Щенников В.Н. Построение оценок погрешности линеаризации систем конечно-разностных уравнений // Изв. вузов. Матем. 2002. № 8. С. 75-78.
5. Халанай А., Векслер Д. Качественная теория импульсных систем. М.: Мир, 1977. 312 с.

MSC2020 39A22

Correctness of the linearization method for the discrete system in one critical case

E. V. Afinogentova

National Research Mordovia State University

Abstract: The linearization method is widely used for the study of nonlinear models. The article considers the question of the correctness of such a method in the case of a discrete system for which the question of stability is not solved by a linear approximation, i.e. there is a critical case. A method is proposed for estimating the deviation of the nonlinear system solution from its linearized version in the critical case of a single unit root.

Keywords: discrete system, stability, critical case.

References

1. Liu Yong-qing. The necessary and sufficient conditions of stability for 1 st-order nonlinear discrete systems in the first critical case. *Adv. Modell. and Simul.* 1988. Vol. 14, No. 3. pp. 1-8.
2. R. P. Agarwal. *Difference equations and inequalities: theory, methods and applications.* New York, Basel: Marcel Dekker, 2000. 985 p.
3. S. Sugiyama. *Difference inequalities and their applications to stability problems.* Lect. Notes Math. 1971. No. 243. pp. 1-15.
4. E.V. Afinogentova, V.N. Shchennikov. "Construction of error estimates for the linearization of finite-difference equations". *Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved. Mat.* 2002. No. 8. pp. 75-78. (in Russian)
5. A. Halanay, D. Veksler. *Kachestvennaya teoriya impul'snykh sistem, "Qualitative theory of impulse systems"*. Mir Publ., Moscow. 1971. 310 p. (in Russian)

УДК 51-73+519.62

Многофазные и многоуровневые математические модели и высокопроизводительные алгоритмы отечественных междисциплинарных программных комплексов нефтедобычи, нефтепереработки и нефтехимии*

Губайдуллин И. М.^{1,2}

Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН¹,
Уфимский государственный нефтяной технический университет²

Аннотация: В статье представлены основные принципы математического моделирования химико-технологических процессов. Подобные модели базируются на уравнениях материального и теплового баланса и кинетических закономерностях химических реакций. Особый интерес представляют каталитические процессы, такие как риформинг, крекинг и изомеризация. В качестве примеров разработанных моделей рассматриваются модель тепломассопереноса в системе «сеть трещин - матрица» и модель нестационарного процесса окислительной регенерации. Отдельно выделено описание методов исследования сложных моделей – анализ кинетических моделей и анализ чувствительности.

Ключевые слова: математическое моделирование, численные методы, химическая кинетика, дифференциальные уравнения, обратная задача химической кинетики, анализ чувствительности параметров

Цифровизация процессов и аппаратов химической технологии требует разработки сложных высоко размерных многофазных и многоуровневых математических моделей. В промышленных установках нефтепереработки и нефтехимии одновременно происходят физические и химические процессы массо- и теплообмена между различными фазами. Особенно сложные процессы протекают в каталитических реакторах, где в порах зерна катализатора происходят гетерогенные химические процессы, и существенными становятся процессы массо- и теплопереноса по неподвижным, по движущимся и кипящим слоям катализатора. Например, в трех основных каталитических процессах получения товарного бензина таких, как риформинг, крекинг и изомеризация, количество участвующих в реакции веществ может достигать 3000, а количество химических стадий может доходить до 300 и выше. Математическое описание таких процессов с учётом химической кинетики, термодинамики, процессов диффузии и т. д. может представлять собой систему обыкновенных дифференциальных уравнений или систему уравнений в частных производных эллиптического, параболического и гиперболического типа размерностью до 1000 уравнений. При этом порядки концентраций различных фаз могут меняться от 10^{-6} до 10^3 моль/л, а масштаб времени колеблется от 10^{-3} до 10^6 сек. Решать такие сложные математические модели возможно только с использованием теории анализа и хранения больших данных и технологии параллельных вычислений, т. е. суперкомпьютеров.

В докладе приведены примеры успешного применения систем дифференциальных урав-

*Работа выполнена по теме «Разработка новых теоретических подходов и программного обеспечения для моделирования сложных химических процессов и поиска соединений с заданными физико-химическими свойствами» (Регистрационный номер: АААА-А19-119022290011-6)

нений (обыкновенных и в частных производных) для математического моделирования в нефтегазовой отрасли, начиная с добычи нефтепродуктов и заканчивая сложными процессами нефтехимии. Разработка запасов углеводородов сложных геолого-геофизических условий становится насущной необходимостью, ведь к ним относится значительная часть еще не открытых и не введенных в эксплуатацию месторождений. На сегодняшний день до 48% запасов нефти и до 30% газа сосредоточено в карбонатных коллекторах, которые мало изучены по сравнению с обычным песчаником в терригенных пластах. Фильтрация жидкости в карбонатных коллекторах отличается от массопереноса в терригенных. Они подчиняются различным законам за счет появления «двойной среды» – каркаса (матрицы) и системы трещин. Для рациональной разработки нефтяных и газовых залежей важным является наличие качественной информации о фильтрационно-емкостных характеристиках коллектора, что напрямую связано с изучением особенностей фильтрации жидкостей в пластах. Это предполагает развитие существующих и разработку новых математических моделей, позволяющих моделировать процесс массопереноса во время гидродинамических исследований при различных геологических условиях, создание программного комплекса для моделирования двухфазной фильтрации в коллекторе трещиновато-порового типа.

Группой нашей школы НОСш_АЛМА-Уфа, возглавляемой Юлией Бобренёвой, разработана математическая модель теплопереноса в системе «сеть трещин - матрица», описанная в виде дифференциальных уравнений второго порядка [1–3]. В основе математического описания процессов фильтрации лежат двухфазные уравнения фильтрации жидкости в трещиновато-поровых коллекторах, записанные в дивергентной форме:

$$\begin{aligned}
 & \frac{\partial (\varphi^f \rho_0 S_0^f)}{\partial t} + \nabla (\rho_0 U_0^f) + q_0^f = \rho_0 q_j, \\
 & \frac{\partial (\varphi^f \rho_w S_w^f)}{\partial t} + \nabla (\rho_w U_w^f) + q_w^f = \rho_w q_j, \\
 & \frac{\partial (\varphi^m \rho_0 S_0^m)}{\partial t} + q_0^m = \rho_0 q_j, \\
 & \frac{\partial (\varphi^m \rho_w S_w^m)}{\partial t} + q_w^m = \rho_w q_j, \\
 & \frac{\partial (S_w^f \varphi^f \rho_w \varepsilon_w)}{\partial t} + \frac{\partial (S_0^f \varphi^f \rho_0 \varepsilon_0)}{\partial t} + \frac{\partial (S_w^m \varphi^m \rho_w \varepsilon_w)}{\partial t} + \frac{\partial (S_0^m \varphi^m \rho_0 \varepsilon_0)}{\partial t} + \\
 & + \frac{\partial}{\partial t} \left[(1 - \varphi^f - \varphi^m) \rho_s \varepsilon_s \right] + \nabla (\rho_w U_w^f \varepsilon_w + \rho_0 U_0^f \varepsilon_0 + P^f (U_w^f + U_0^f)) + \nabla W = q_\varepsilon.
 \end{aligned} \tag{1}$$

Здесь s – скелет, ε_i – внутренняя энергия, ρ_s – плотность скелета, q_ε – источник энергии, $\alpha = f, m$, где f – система трещин, m – система матриц, $i = o, w$, где o – нефть, w – вода, P^f – пластовое давление в сети трещин (МПа), P^m – пластовое давление в матрице (МПа), φ^f – пористость в системе трещин, φ^m – пористость в матрице, ρ_o – плотность нефти (г/м³), ρ_w – плотность воды (г/м³), S_i^f – насыщенность нефти/воды в системе трещин, S_i^m – насыщенность нефти/воды в матрице, U_i^f – скорость течения нефти/воды, q_j – дебит жидкости (м³/сут), q_i^α – функция перетока между матрицей и трещинами; предполагается отсутствие течения в матрице.

Получившаяся система (1) без начальных и граничных условий является сложной системой уравнений математической физики смешанного типа. Данная система решается методом конечных разностей, но это влечет за собой ряд трудностей, которые связаны с большим количеством переменных и отсутствием важных свойств матрицы, таких как самосопряженность и симметричность, характерных только для пьезопроводных процессов. Для решения данной проблемы предлагается провести полное расщепление по физическим процессам.

Большое количество задач математического моделирования связано с каталитическими процессами нефтепереработки. С каждым годом увеличиваются требования к качеству продуктов нефтепереработки и многократно возрастают экологические ограничения по элементному составу [4]. Один из основных продуктов нефтепереработки – товарный бензин (АИ-98, АИ-95, АИ-92 – экологический класс Евро-5 и Евро-6), реализуемый с автозаправочных станций, представляет собой сложную смесь углеводородов. От состава бензина зависят все эксплуатационные свойства товарных бензинов, в том числе и октановое число, определяющее марку товарного бензина, а следовательно, и его цену. Получение товарного бензина, соответствующего всем показателям качества, невозможно с применением одной технологии, поэтому на нефтеперерабатывающих заводах (НПЗ) используют несколько технологий (от 3 до 6) для получения компонентов бензина, которые на последней стадии подвергаются смешению. Таким образом, необходимы надежные современные методы исследования, которые позволяют определять не только точный состав продуктов нефтепереработки, но и управлять концентрациями компонентов в любой момент времени во время химических превращений. Такие задачи могут быть решены только с помощью кинетических моделей. Таким образом, от подробного понимания стадий химических превращений зависит, в конечном итоге, получение качественных продуктов нефтепереработки.

Динамика концентраций веществ в ходе реакции описывается системой обыкновенных нелинейных дифференциальных уравнений (СОНДУ). Вид математической модели зависит от условий проведения реакций. Рассмотрим некоторые из них.

Математическое описание гомогенной (однофазной) изотермической (при постоянной температуре) нестационарной (по концентрациям веществ) реакции, протекающей без изменения объема реакционной смеси в закрытой системе по закону действующих масс имеет следующий вид:

$$\frac{dy_i}{dt} = \Phi_K \sum_{j=1}^J \nu_{ij} \omega_j, \quad i = 1, \dots, I; \quad (2)$$

$$\frac{dy_i}{d\tau} = \sum_{j=1}^J \nu_{ij} \omega_j, \quad i = 1, \dots, I; \quad (3)$$

$$\omega_j = k_j \cdot \prod_{i=1}^I (y_i)^{\alpha_{ij}} - k_{-j} \cdot \prod_{i=1}^I (y_i)^{\beta_{ij}};$$

$$k_j = k_j^0 \cdot \exp\left(-\frac{E_j^+}{RT}\right); \quad k_{-j} = k_{-j}^0 \cdot \exp\left(-\frac{E_j^-}{RT}\right); \quad (4)$$

начальные условия: при $t = 0$ $y_i(0) = y_i^0$; при $\tau = 0$ $y_i(0) = y_i^0$; $t, \tau \in [0, t^*]$.

Здесь y_i – концентрации реагентов реакции, моль/л или доли; t – время, мин; τ – условное время контакта реакционной смеси с катализатором, кг·мин/моль или кг кат.; Φ_K определяет количество катализатора в реакции, моль/л или моль/кг; J – количество стадий; I – количество веществ; ν_{ij} – стехиометрическая матрица; ω_j – скорость j -ой стадии, 1/мин или моль/(кг·мин); k_j, k_{-j} – константы скоростей стадий (приведенные), 1/мин; α_{ij} – отрицательные элементы матрицы ν_{ij} , β_{ij} – положительные элементы ν_{ij} , k_j^0, k_{-j}^0 – предэкспоненциальные множители, 1/мин; E_j^+, E_j^- – энергии активации прямой и обратной реакций, ккал/моль; R – газовая постоянная, 2 кал/(моль·К); T – температура, К, t^* – продолжительность реакции, мин.

Система (2)-(4) определяет изменение концентраций реагентов для периодического (2) или непрерывного (3) процесса. В случае периодического процесса множитель Φ_K определяет количество катализатора в реакции. В случае непрерывного процесса учет взаимодействия с катализатором определяется через время контакта τ . Модель (2)-(4) предполагает допущение выполнения уравнения Аррениуса для неэлементарных стадий.

При исследовании гомогенных изотермических процессов достаточно использовать ма-

тематическое описание (2)-(4). Однако, для каталитических реакций, протекающих с изменением температуры необходим учет термодинамических параметров:

$$\frac{dT}{d\tau} = - \frac{\sum_{i=1}^I \frac{dy_i}{d\tau} \cdot \Delta H_i(T)}{\sum_{i=1}^I y_i \cdot C_{pi}(T)}; \quad T(0) = T^0; \quad (5)$$

$$\Delta H_i(T) = \Delta H_i(298) + \int_{298}^T C_{pi}(T) dT; \quad C_{pi}(T) = a_i + b_i T + c_i T^2 + d_i T^3 + e_i T^4;$$

где $\Delta H_i(T)$ – энтальпия образования i -го компонента при температуре T , Дж/моль; $C_{pi}(T)$ – удельная теплоемкость i -го компонента при температуре T , Дж/(моль·К); a_i, b_i, c_i, d_i, e_i – коэффициенты температурной зависимости теплоемкости i -го компонента.

Химические системы часто характеризуются изменением объема реакционной смеси, т. е. для отдельных стадий возможны увеличения или уменьшения количества молей. Мольный расход реакционной смеси формируется из мольных расходов компонентов. Уравнение, учитывающее изменение количества молей реакционной смеси Q (моль/мин), имеет вид:

$$\frac{dQ}{d\tau} = \sum_{i=1}^I \frac{dy_i}{d\tau}; \quad Q(0) = Q^0; \quad (6)$$

$$\omega_j = k_j \cdot \prod_{i=1}^I \left(\frac{y_i}{Q}\right)^{|\alpha_{ij}|} - k_{-j} \cdot \prod_{i=1}^I \left(\frac{y_i}{Q}\right)^{\beta_{ij}}.$$

В (6) описывается изменение мольного расхода смеси. В качестве концентраций используются мольные доли, которые представлены в уравнении изменения скоростей стадий отношением мольного расхода компонента к мольному расходу смеси, благодаря чему система учитывает разбавление или концентрирование всех компонентов в каждый момент времени.

При создании моделей сложных гетерогенных каталитических реакций использование кинетических уравнений в рамках закона действующих масс уже не позволяет адекватно описывать качественные и количественные закономерности протекания процесса. Необходимо использовать более сложные кинетические уравнения, например, зависимости Ленгмюра-Хиншельвуда, учитывающие адсорбцию компонентов на поверхности катализатора.

Принимается, что в гетерогенном катализе компоненты адсорбируются на поверхности катализатора и приходят с этой поверхностью в состояние теплового равновесия. Такое состояние называется хемосорбированным. По окончании реакции происходит десорбция образованных продуктов реакции. В уравнение изменения скоростей стадий (4) из СОНДУ (2) вводится учет доли поверхности катализатора, занятой реагентами:

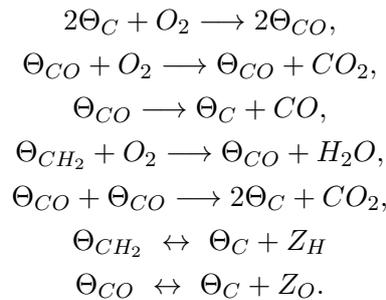
$$\omega_j = k_j \cdot \prod_{i=1}^I (y_i)^{|\alpha_{ij}|} \cdot \prod_{i=1}^I (\Theta_i)^{|\alpha_{ij}|} - k_{-j} \cdot \prod_{i=1}^I (y_i)^{\beta_{ij}} \cdot \prod_{i=1}^I (\Theta_i)^{\beta_{ij}}; \quad (7)$$

$$\Theta^* = 1 - \sum_{i=1}^I \Theta_i; \quad \Theta_i = \Theta_i(y) = \frac{b_i \cdot y_i}{1 + \sum_{i=1}^I b_i \cdot y_i}; \quad \Theta^*(0) = 1; \quad \Theta_i(0) = 0.$$

Здесь Θ_i – доля поверхности катализатора, занятая i -м компонентом; Θ^* – свободная доля поверхности катализатора в любой момент времени; b_i – коэффициент адсорбции i -го вещества, л/моль.

Математическое описание гетерогенной нестационарной реакции на основе механизма Ленгмюра-Хиншельвуда имеет вид (2), (7). Модель (2), (7) предполагает допущение о равномерности распределения активных центров на поверхности катализатора с равномерной активностью.

Примером чёткой двухфазной модели является математическая модель нестационарного процесса окислительной регенерации, сложные химические стадии которой имеют следующий вид [5, 6]:



Здесь Θ_C – свободная углеродная поверхность, Θ_{CO} – кислород-углеродный комплекс, Θ_{CH_2} – водород-углеродный комплекс в составе коксовых отложений; O_2 – кислород, содержащийся в реакционной смеси; CO_2 – углекислый газ; CO – угарный газ; H_2O – водяной пар; Z_H и Z_O – водород и кислород, образующиеся вследствие разрушения кислород-углеродного и водород-углеродного комплексов соответственно.

В таблице приведены скорости элементарных стадий и численные значения констант скоростей, рассчитанные для температуры 793,15 К:

Скорость стадии	Константа скорости, c^{-1}
$\omega_1 = k_1(T) \Theta_3^2 x_1$	0.112
$\omega_2 = k_2(T) \Theta_2 x_1$	0.563
$\omega_3 = k_3(T) \Theta_2$	0.22
$\omega_4 = k_4(T) \Theta_1 x_1$	0.315
$\omega_5 = k_5(T) \Theta_2^2$	1.890
$\omega_6 = k_6(T) \frac{\rho_C}{R_C} (\Theta_1^* - z_1)$	5.923
$\omega_7 = k_7(T) \frac{\rho_C}{R_C} (\Theta_2^* - z_2)$	1.890

Здесь Θ_1 , Θ_2 и Θ_3 соответствуют долям Θ_{CH_2} , Θ_{CO} и Θ_C в составе коксовых отложений; x_1 – концентрация кислорода в реакционной смеси, мольные доли; z_1 и z_2 – массовые доли Z_H и Z_O ; ρ_C – плотность кокса, $г/м^3$; R_C – средний радиус коксовых гранул, м; k_i , $i = \overline{1, 7}$ – константы скоростей стадий реакции, размерность k_i , $i = \overline{1, 5}$ – $1/с$, $i = \overline{6, 7}$ – $м^2/с$.

Математическая модель реакции имеет следующий вид:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dq_c}{dt} = -M_C S_k (\omega_2 + \omega_3 + \omega_5), \\ \frac{dz_1}{dt} = \frac{3k_6 \rho_C}{R_C} \left(\frac{\Theta_1}{6} - z_1 \right) + z_1 \frac{M_C S_k}{q_C} (\omega_2 + \omega_3 + \omega_5), \\ \frac{dz_2}{dt} = \frac{3k_7 \rho_C}{R_C} \left(\frac{4\Theta_2}{3} - z_2 \right) + z_2 \frac{M_C S_k}{q_C} (\omega_2 + \omega_3 + \omega_5), \\ \frac{dx_1}{dt} = -\frac{\gamma_k S_k}{c_0} (\omega_1 + \omega_2 + \omega_4) \\ \frac{dx_2}{dt} = \frac{\gamma_k S_k}{c_0} (\omega_2 + \omega_5) \\ \frac{dx_3}{dt} = \frac{c_0}{\gamma_k S_k} \omega_3 \\ \frac{dx_4}{dt} = \frac{c_0}{\gamma_k S_k} \omega_4 \end{array} \right. , \quad (8)$$

$$q_C(0) = q_C^0, \quad z_1(0) = z_1^0, \quad z_2(0) = 0, \quad x_1(0) = x_1^0, \quad x_2(0) = 0, \quad x_3(0) = 0, \quad x_4(0) = 0. \quad (9)$$

Математическое описание задач химической кинетики (2)-(7) представляет собой систему обыкновенных нелинейных дифференциальных уравнений с начальными данными, т. е. задачу Коши. Быстрые и медленные реакции определяют трудности при численном решении прямой кинетической задачи.

Для точного решения по быстрым переменным необходимо выбирать шаг интегрирования. Он должен быть значительно меньше, чем полное время протекания процесса, определяемое по медленным переменным. Прямые задачи химической кинетики (2)-(7) преимущественно являются жесткими и требуют применения специфических численных методов.

Таким образом, задачи химической кинетики с математической точки зрения сводятся к задаче решения и исследования систем нелинейных дифференциальных уравнений первого порядка с коэффициентами, роль которых играют константы скоростей реакции. В общем виде система уравнений химической кинетики имеет вид [9]:

$$\frac{d\bar{x}}{dt} = f(\bar{x}, \bar{k}), \quad (10)$$

с начальными условиями

$$\bar{x}(0) = \bar{x}_0. \quad (11)$$

Здесь $\bar{k} = (k_1, \dots, k_m)$ – вектор параметров, в качестве которых могут выступать, например, константы скорости элементарных реакций, $\bar{x} = (x_1, \dots, x_n)$, $\bar{x}_0 = (x_{10}, \dots, x_{n0})$ – вектор текущих и начальных концентраций, $f = (f_1, \dots, f_n)$ – функция кинетических зависимостей, которая строится в соответствии с принятым механизмом химических превращений, t – время проведения реакции.

При изучении динамических процессов вида (10) возникает вопрос неединственности набора параметров \bar{k} удовлетворяющего имеющимся экспериментальным данным. С другой стороны, зачастую по измеренным данным невозможно определить набор параметров \bar{k} . Нередко в лабораторных исследованиях проведение экспериментов по получению данных \bar{x} является либо финансово-затратной, либо невозможной процедурой.

Задача определения параметров модели по экспериментальной информации называется обратной задачей [7, 8]. Но прежде чем решать обратную задачу, необходимо найти условия корректности задачи (существование, единственность и/или устойчивость решения). Анализ идентифицируемости позволяет выделить условия корректности обратной задачи. Разработано множество методов структурной и параметрической идентифицируемости модели, большинство из них основаны на анализе чувствительности модели [7].

Анализ чувствительности [10, 11] для оценки идентифицируемости неизвестных параметров модели (10) используется до построения алгоритмов численного решения задач идентификации параметров. Исследование чувствительности для математической модели проводится относительно некоторых номинальных параметров, значения которых берутся из литературных источников или доступной статистической информации.

Коэффициенты чувствительности для переменной $x_i(t)$ по параметру k_j определяются как предел отношения

$$s_{ij} = \frac{\partial x_i(t)}{\partial k_j}. \quad (12)$$

Уравнения для вычисления s_{ij} получим с помощью частного дифференцирования обеих частей системы уравнения (10) и начальных условий (11) по параметру k_j

$$\frac{ds_{ij}}{dt} = \sum_{h=1}^n \frac{\partial f_i}{\partial x_h} s_{hj} + \frac{\partial f_i}{\partial k_j}. \quad (13)$$

Здесь $\frac{\partial \bar{f}}{\partial \bar{x}}$ – матрица Якоби системы ОДУ, а $\frac{\partial \bar{f}}{\partial \bar{k}}$ – производная правой части по рассматриваемым параметрам.

В качестве начальных условий для этой системы линейных обыкновенных дифференциальных уравнений с постоянными коэффициентами имеем

$$\frac{\partial x_i}{\partial k_j}(0) = 0. \quad (14)$$

Вычисление функций чувствительности для всего комплекса параметров системы (10) сводится к совместному интегрированию уравнений вида (13) для каждого параметра k_j ($j = 1, \dots, m$).

Таким образом, в работе приведены примеры математических моделей в виде нелинейных обыкновенных дифференциальных уравнений и уравнений в частных производных. Отмечено, что в зависимости от условия проведения нефтегазовых разработок и режимов ведения каталитических процессов вид дифференциальных уравнений в математических моделях различен. Кроме того, в настоящее время актуальным вопросом остается развитие качественных методов исследования дифференциальных уравнений для оптимизации промышленных технологических процессов.

Литература

1. Мазитов А.А., Бобренёва Ю.О., Губайдуллин И.М. Математическое моделирование нестационарного течения многофазного потока в пористой среде // В сборнике: Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ. Сборник материалов IX Международной научной молодежной школы-семинара имени Е.В. Воскресенского. Редколлегия: В.Ф. Тишкин (отв. ред.) [и др.]. 2020. С. 94-95.
2. Смирнов Д.Д., Бобренёва Ю.О., Мазитов А.А., Марченко М.А., Губайдуллин И.М., Черных И.Г. Параллельный алгоритм численного метода моделирования массопереноса в трещиновато-поровом коллекторе на суперкомпьютере // В сборнике: Параллельные вычислительные технологии (ПаВТ'2020). Короткие статьи и описания плакатов. 2020. С. 255-264.
3. Бобренева Ю.О., Рагимли П.И.К., Подрыга В.О., Бажитова С.С., Бакир А.Э., Абу-Наб А.К. Об одном методе численного моделирования двухфазной жидкой системы в коллекторе трещиновато-порового типа // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. 2021. № 38. С. 1-20.

4. Капустин В.М. Технология производства автомобильных бензинов. М.: Химия, 2015.
5. Масагутов Р.М., Морозов Б.Ф., Кутепов Б.И. Регенерация катализаторов в нефтепереработке и нефтехимии. М.: Химия, 1987. 144 с.
6. Губайдуллин И.М., Язовцева О.С. Исследование усредненной модели окислительной регенерации закоксованного катализатора // Компьютерные исследования и моделирование. 2021. Т. 13, № 1. С. 149-161. DOI 10.20537/2076-7633-2021-13-1-149-161.
7. Спивак С.И., Губайдуллин И.М., Вайман Е.В. Обратные задачи химической кинетики. Уфа: РИО БашГУ, 2003. 110 с.
8. Губайдуллин И.М., Сайфуллина Л.В., Еникеев М.Р. Информационно-аналитическая система обратных задач химической кинетики. Уфа: БашГУ. 2003. 89 с.
9. Miao H., Xia X., Perelson A. S., We H. On Identifiability of nonlinear ode models and applications inviral dynamics. SIAM Rec. Soc. Ind. Appl. Math. 2011. Vol. 53, No. 1. 3–39.
10. Nurislamova L.F., Gubaydullin I.M. Mechanism reduction of chemical reaction based on sensitivity analysis: development and testing of some new procedure. Journal of Mathematical Chemistry, 2017. Vol. 55, Issue 9. 1779-1792.
11. Сафиуллина Л.Ф., Коледина К.Ф., Губайдуллин И.М., Зайнуллин Р.З. Исследование математической модели каталитического риформинга бензина методами анализа чувствительности // Вычислительные методы и программирование. 2020. Т. 21, № 4. 440-451.

MSC2020 00A71

Multiphase and multilevel mathematical models and high-performance algorithms of domestic interdisciplinary software systems for oil production, oil refining and petrochemistry

I. M. Gubaydullin^{1,2}

Institute of Petrochemistry and Catalysis of the Russian Academy of Sciences¹,
Ufa State Petroleum Technological University²

Abstract: The article presents the basic principles of mathematical modeling of chemical-technological processes. Such models are based on the equations of material and heat balance and kinetic laws of chemical reactions. Special interest is in the catalytic processes such as reforming, cracking and isomerization. There are the model of heat and mass transfer in the «network of cracks - matrix» system and a model of a non-stationary process of oxidative regeneration as examples of the developed models. There are the description of methods for studying complex models: the analysis of kinetic models and the sensitivity analysis.

Keywords: mathematical modeling, numerical methods, chemical kinetics, differential equations, the inverse problem of chemical kinetics, the sensitivity analysis of parameters

References

1. A. A. Mazitov, Y. O. Bobreneva, I. M. Gubaydullin. Mathematical modeling of unsteady multiphase flow in a porous medium. Proceedings of the International Scientific Youth School-Seminar «Mathematical Modeling, Numerical Methods and Software complexes» named after E.V. Voskresensky (Saransk, October 8-11, 2020). Saransk: SVMO Publ, 2020. pp. 94-95. (In Russ.)
2. D. D. Smirnov, Yu. O. Bobreneva, A. A. Mazitov, M. A. Marchenko, I. M. Gubaidullin, I. G. Chernykh. Parallel algorithm of a numerical method for modeling of fluid flow processes in a fractured-porous reservoir on a supercomputer. In the collection: Parallel Computing Technologies (PaVT'2020). Short articles and poster descriptions. 2020. pp. 255-264. (In Russ.)
3. Yu. O. Bobreneva, P. I. Rahimly, V. O. Podryga, S. S. Bazhitova, A. E. Bakir, A. K. Abu-Nab. On one method of numerical modeling of a two-phase fluid system in a fractured-porous reservoir. Keldysh Institute preprints. 2021. No. 38, pp. 1-20. (In Russ.)
4. V. M. Kapustin. Tekhnologiya proizvodstva avtomobil'nykh benzinov ["Technology of automobile gasoline production"]. Moscow: Chemistry, 2015. (In Russ.)
5. R. M. Masagutov, B. F. Morozov, B. I. Kutepov. Regeneratsiya katalizatorov v neftepererabotke i neftekhimii ["Catalyst regeneration in oil refining and petrochemistry"]. Moscow: Chemistry, 1987. 144 p. (In Russ.)
6. I. M. Gubaydullin, O. S. Yazovtseva. Investigation of the averaged model of coked catalyst oxidative regeneration. Computer Research and Modeling, 2021, Vol. 13, No. 1. pp. 149-161. (In Russ.)

7. S. I. Spivak, I. M. Gubaydullin, E. V. Vajman. *Obratnye zadachi khimicheskoy kinetiki* ["Inverse problems of chemical kinetics"]. Ufa: RIO BashGU, 2003. 110 p. (In Russ.)
8. I. M. Gubaidullin, L. V. Saifullina, M. R. Enikeev. *Informatsionno-analiticheskaya sistema obratnykh zadach khimicheskoy kinetiki* ["Information-analytical system of inverse problems of chemical kinetics"]. Ufa: BashGU. 2003. 89 p. (In Russ.)
9. Miao H., Xia X., Perelson A. S., We H. On Identifiability of nonlinear ode models and applications inviral dynamics. *SIAM Rec. Soc. Ind. Appl. Math.* 2011. Vol. 53, No. 1. 3–39.
10. L. F. Nurislamova, I. M. Gubaydullin. Mechanism reduction of chemical reaction based on sensitivity analysis: development and testing of some new procedure. *Journal of Mathematical Chemistry*, 2017. Vol. 55, Issue 9. 1779-1792.
11. L. F. Safiullina, K. F. Koledina, I. M. Gubaydullin, R. Z. Zaynullin. Study of a mathematical model of gasoline catalytic reforming by sensitivity analysis methods. *Num. Meth. Prog.* Vol. 21, Issue 4. 2020. pp. 440–451. (In Russ.)

УДК 519.63

Математическое моделирование геофизических процессов в слое электропроводящей жидкости переменной глубины

Казанков В. К., Холодова С. Е.

Университет ИТМО

Аннотация: Рассматривается краевая задача магнитной гидродинамики, которая в приближении длинных волн малой амплитуды редуцируется к интегрированию одного скалярного уравнения для модифицированной функции, описывающей возмущение свободной поверхности жидкого слоя. Решение полученного дисперсионного уравнения сводится к поиску корней полинома шестой степени с комплексными коэффициентами. В статье обзревается численный метод и алгоритм, созданный на основе машинного обучения и итерационного численного метода, который позволяет отыскать различные корни данного полинома. Проводится анализ зависимости решения от параметра Кориолиса, волнового числа и магнитного числа Рейнольдса, который позволяет оценить качественно и численно динамику процесса.

Ключевые слова: магнитная гидродинамика вращающейся жидкости, дифференциальные уравнения в частных производных, математическое моделирование, магнитное число Рейнольдса.

1. Введение

Одним из классических методов описания динамики жидкости является составление системы дифференциальных уравнений в частных производных с граничными и начальными условиями. Если рассматривается движение электропроводящей жидкости в магнитном поле, то в ней могут возникать электрические точки, которые способны оказывать существенное влияние на магнитное поле и характер движения среды. Существует прямая связь между гидродинамическим движением и электромагнитными эффектами, и чем больше линейный масштаб рассматриваемого явления, тем сильнее взаимосвязь.

В работе рассматривается задача магнитной гидродинамики, которая в приближении длинных волн малой амплитуды редуцируется к интегрированию одного скалярного уравнения для модифицированной функции, описывающей возмущение свободной поверхности жидкого слоя.

Представленная математическая модель описывает ряд динамических процессов, происходящих как в технических, например, в реакторах на быстрых нейтронах, так и в природных системах – в недрах звезд и в толще океана [1, 2].

2. Постановка задачи

Динамика вращающейся несжимаемой электропроводящей жидкости описывается системой дифференциальных уравнений в частных производных [3]:

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \langle \mathbf{v} \cdot \nabla \rangle \mathbf{v} = -\frac{\nabla p}{\rho} - 2\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{v} - g\mathbf{z} + \frac{1}{\mu\rho} [\text{rot } \mathbf{b} \times \mathbf{b}],$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial \mathbf{b}}{\partial t} &= \text{rot} [\mathbf{b} \times \mathbf{v}] + \frac{1}{\mu\sigma} \Delta \mathbf{b}, \\ \text{div } \mathbf{b} &= 0, \\ \text{div } \mathbf{v} &= 0,\end{aligned}$$

с граничными условиями на поверхностях $z = h_B(x, y, t)$ и $z = Z(x, y)$ вида

$$b_z(x, y, h_B, t) = b_{z0}(x, y, t), \quad b_z(x, y, Z, t) = b_{z0}^{(e)},$$

где h_B – свободная поверхность жидкого слоя, вращающейся со скоростью $\boldsymbol{\omega}$, p – давление, ρ – плотность, \mathbf{b} – вектор магнитной индукции поля, μ – магнитная проницаемость, σ – электрическая проводимость, $Z(x, y)$ – непроницаемое твердое дно.

В случае длинных волн малой амплитуды решение исходной краевой задачи сводится к решению одного скалярного уравнения

$$\mathcal{D} (\mathcal{D}_t^2 + \alpha^2) \left(\left(\mathcal{D}_t - \frac{\Delta}{R_m} \right) \mathcal{D}_t - \frac{\mathcal{D}^2}{\mu\rho} \right) \Delta_2 \xi = \frac{b_{z0}^{(e)} - b_{z0}}{(\mu\rho)^2 H_0} \quad (1)$$

для некоторой модифицированной функции возмущения глубины слоя ξ [3].

В работах [4, 5] доказано существование решения уравнения (1) в виде гармоник

$$\xi = \text{Im}(A \exp(i(kx + ly - \sigma t))) \quad (2)$$

как для конечных, так и бесконечного значений магнитного числа Рейнольдса, причем частота σ является решением дисперсионного уравнения

$$P_n(\sigma) = \sum_{k=0}^n c_k \sigma^k, \quad (3)$$

где $c_k \in \mathbb{C}$ определяются из соотношений физических величин, которые в дальнейшем будем называть физическими параметрами. Корни полинома $P_n(\sigma)$ обозначим за $\tilde{\sigma}$. Согласно основной теореме алгебры, существует ровно n штук $\tilde{\sigma}$ с учетом их кратностей. Каждый характеризует динамику исследуемого процесса.

Пусть $b_{z0}^{(e)} - b_{z0} = \text{Im}(\tilde{B} \exp(2i(kx + ly)) \exp(-i\sigma t))$, а глубина H_0 представима в виде функции

$$H_0 = \text{Im}(\tilde{H}_0 \exp(i(kx + ly))),$$

тогда уравнение (3) принимает вид

$$(kb_{0x} + lb_{0y}) (k^2 + l^2) (\alpha^2 - \sigma^2)^2 \left(\sigma^2 + \sigma \frac{i(l^2 + k^2)}{R_m} + \frac{(kb_{0x} + lb_{0y})^2}{\mu\rho} \right) = \frac{\tilde{B}}{\tilde{H}_0 (\mu\rho)^2}. \quad (4)$$

Для анализа уравнения (4) следует найти корни $\tilde{\sigma}$ полинома $P_n(\sigma)$. В рассматриваемом случае $n = 6$. Поиск $\tilde{\sigma}$ производится с помощью алгоритма, основанного на машинном обучении и итерационном численном методе.

Итерационные численные методы [6], основанные на построении касательных полиномов $P_q(\sigma)$, где $q < n$, обладают высокой скоростью сходимости к корню $\tilde{\sigma}$ из начального приближения σ^0 , иначе говоря, $\sigma^0 \rightarrow \tilde{\sigma}$. При этом $\tilde{\sigma} \in Q$, где Q принадлежит внутренности пересечения поверхностей, образованных полиномами $P_q(\sigma)$ и $P_n(\sigma)$.

Возникает необходимость в выборе набора начальных приближений $\{\sigma_k^0\}$ таких, чтобы $\sigma_k^0 \rightarrow \tilde{\sigma}_j$, где $\{\tilde{\sigma}_j\}_{j \leq n}$ – множество уникальных корней $\tilde{\sigma}_j$. Для получения начальных приближений используется метод имитации отжига [7] с минимизацией функционала вида

$$L(\sigma) = |P_n(\sigma)|.$$

3. Результаты

Итоговая модель имеет физические входные параметры: A – амплитуда гармоники, \widetilde{H}_0 – амплитуда невозмущенной глубины жидкого слоя, α – параметр Кориолиса, μ – магнитная проницаемость, ρ – плотность, Rm – магнитное число Рейнольдса, k и l – волновые числа, b_{0x} и b_{0y} – проекции вектора магнитной индукции внешнего поля на оси x и y , $b_{n0}^{(e)}$ – нормальная компонента вектора магнитной индукции на ограничивающей жидкий слой поверхности; и программные параметры: r – радиус шара генерации начальных приближений, h – шаг дискретизации зависимости физического параметра от $\tilde{\sigma} \in Q$. При изучении зависимости исследуемого физического параметра от $\tilde{\sigma}$ на отрезке $[0,01; 20]$ значения остальных физических параметров фиксировались равными 1, кроме $g = 9,8$, с шагом $h = 0,2$ и $r = 50$.

Пусть $\tilde{\sigma} = \sigma_1 + i\sigma_2$, тогда решение (2) представимо в виде суммы гармоник

$$\xi = -A \sin(kx + ly) \sin(\sigma_1 t) e^{\sigma_2 t}.$$

Знак мнимой части $\tilde{\sigma}$ определяет динамику гармоники. Если $\sigma_2 < 0$, то гармоника быстро затухает, при $\sigma_2 > 0$ наблюдается неустойчивый режим, а при $\sigma_2 = 0$ следует существование периодического режима.

На рисунках, представленных ниже, показана графическая интерпретация зависимости $\tilde{\sigma}$ от исследуемого параметра, где верхняя пара ячеек показывает распределение $\tilde{\sigma}$ для неоднородного уравнения (4), а нижняя пара отображает распределение $\tilde{\sigma}$ для однородного уравнению, соответствующего уравнению (4) при $\widetilde{B}_0 = 0$. Правые графики показывают изменение $Im(\tilde{\sigma})$, а левые – $Re(\tilde{\sigma})$.

На рис. 1 представлены зависимости $\tilde{\sigma}$ от параметра Кориолиса $\alpha \in [0,01; 20]$.

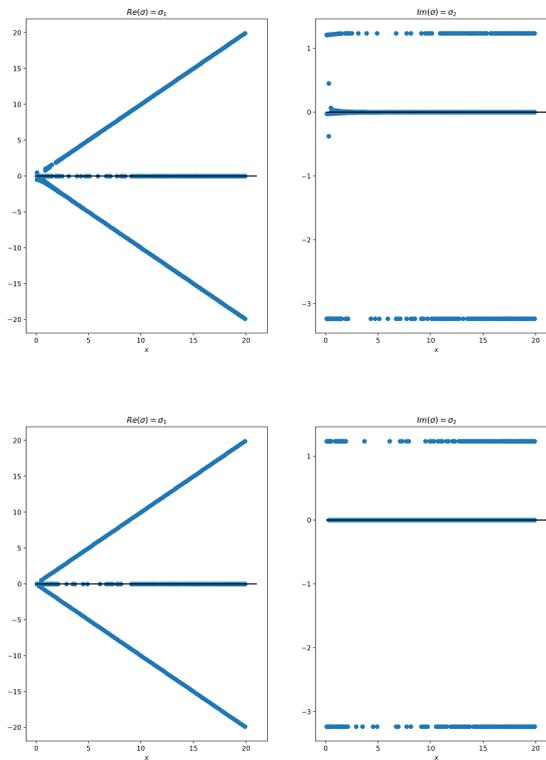


Рис. 1. Зависимость корней от параметра Кориолиса

Верхняя пара распределений практически неотличима от нижней, следовательно при

быстром вращении слоя внешняя магнитное поле оказывает несущественное влияние на динамику процесса внутри жидкого слоя. С ростом α ветки корней σ_2 приобретают асимптотическое поведение, что приводит к периодическому режиму, так как гармоника, образованная отрицательным значением σ_2 убывает быстрее, чем растет гармоника, образованная положительным значением σ_2 .

Визуализация распределения $\tilde{\sigma}$ от волнового числа k представлена на рис. 2. При малых значениях волнового числа k наблюдается значительное расхождение значений частоты колебаний, обусловленное действием внешнего магнитного поля, но расхождение сглаживается с ростом значения волнового числа, приводя к затуханию динамического процесса.

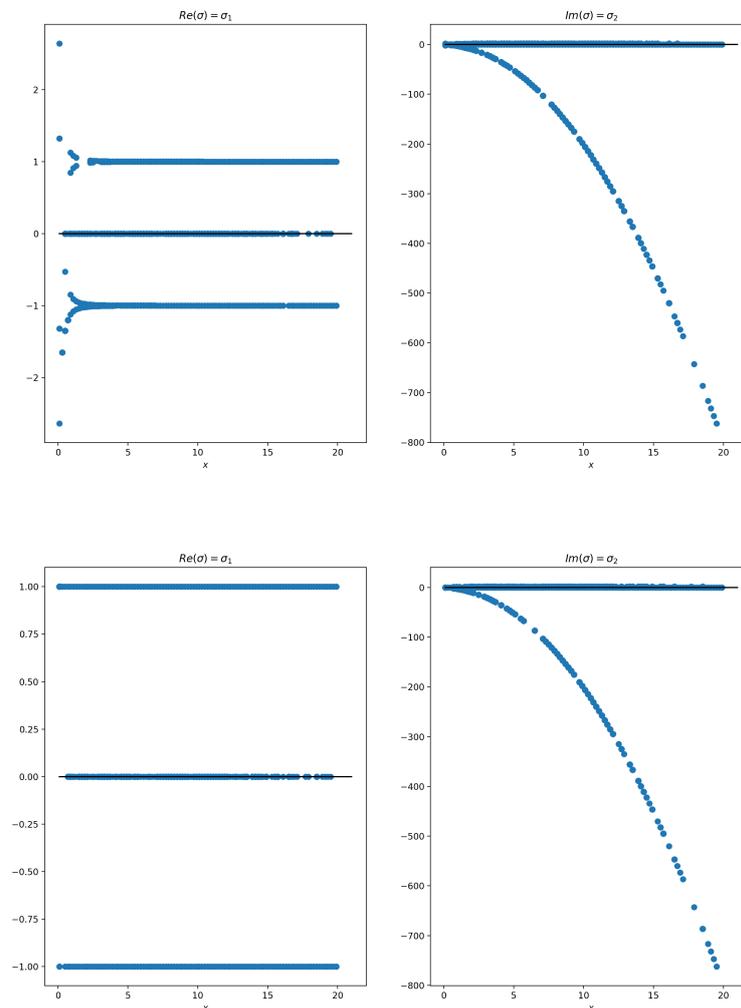


Рис. 2. Зависимость корней от волнового числа

Наиболее существенные отличия распределения решений неоднородного уравнения от однородного видны на рис. 3, 4. В первом случае ярко выражены шесть ветвей корней, но только четыре ветви для однородного уравнения. В обоих случаях гармоники, образованные положительным значением $\tilde{\sigma}$ растут быстрее, чем гармоники, образованные отрицательным значением $\tilde{\sigma}$, что на достаточно небольшом временном промежутке приводит к неустойчивому режиму для $Rm > 2$.

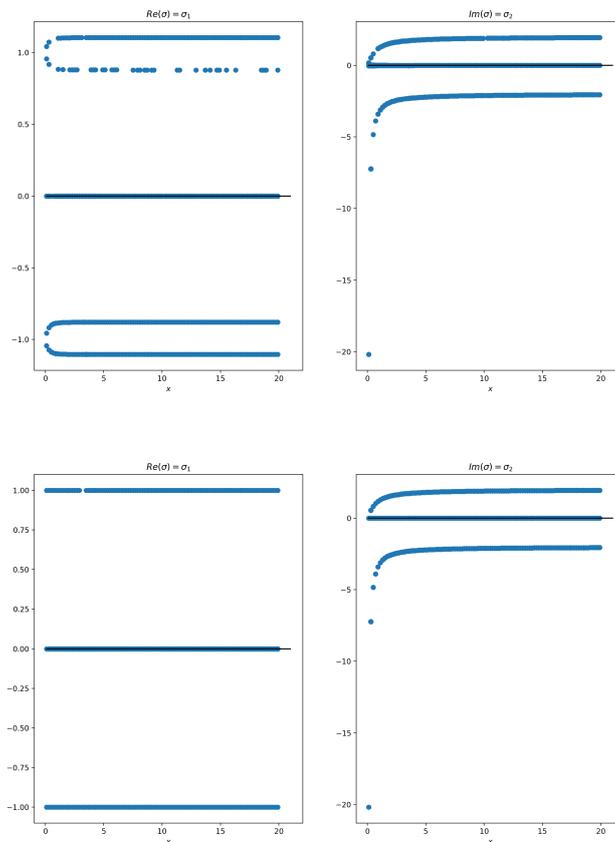


Рис. 3. Зависимость корней от магнитного числа Рейнольдса

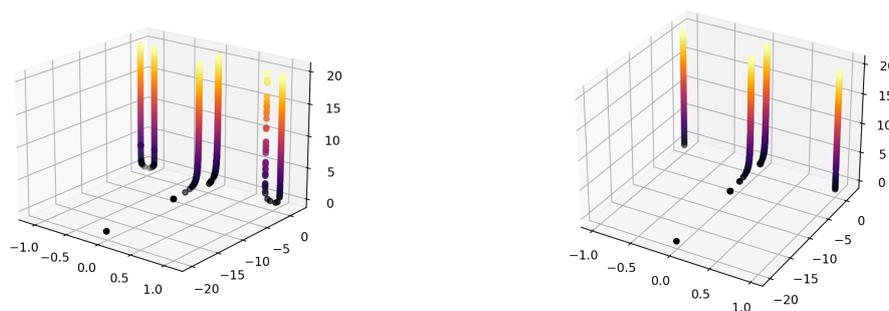


Рис. 4. Пространственная визуализация зависимости корней от магнитного числа Рейнольдса

На рис. 5 представлена графическая визуализация построенного решения, определяющего гидродинамический процесс при $Rm = 1$. Из рисунка видно, что на достаточно небольшом временном промежутке существует вполне периодический режим, а при $t \rightarrow \infty$ процесс приобретает неустойчивый характер. При уменьшении значения магнитного числа Рейнольдса будет увеличиваться время существования периодического режима.

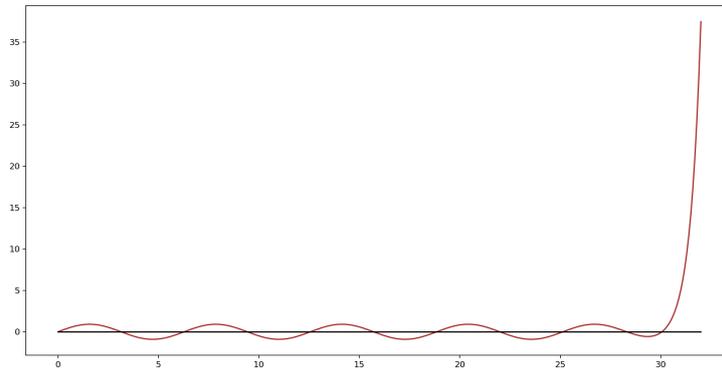


Рис. 5. Динамика процесса при $Rm = 1$

4. Заключение

Разработан метод поиска корней полинома произвольной степени в комплексной области с комплексными коэффициентами, реализован алгоритм на языке программирования Python. Представлен качественный и численный анализ динамики идеальной вращающейся электропроводящей жидкости переменной глубины при изменении значения магнитного числа Рейнольдса, параметра Кориолиса и волнового числа как при наличии внешнего магнитного поля, так и при его отключении.

Литература

1. Zhang K. K., Busse F. H. Generation of magnetic fields by convection in a rotating spherical fluid shell of infinite Prandtl number // J. Phys. Earth Planet. Inter. 1990. Vol. 59, Issue 3. pp. 208–222.
2. Glatzmaier G.A., Roberts P.H. Computer simulations of Earth's magnetic field // Geowissenschaften. 1997. Vol. 15. pp. 95-99.
3. Peregudin S., Peregudina E., Kholodova S. On integration of the system of MHD equations modeling wave processes in a rotating liquid with arbitrary magnetic Reynolds number // Journal of Physics: Conference Series. 2019. Vol. 1268, No 1. pp. 012055.
4. Peregudin S., Peregudina E., Kholodova S. The influence of dissipative effects on dynamic processes in a rotating electrically conductive liquid medium // Journal of Physics: Conference Series. 2019. Vol. 1359, No 1. pp. 012118.
5. Холодова С. Е. Динамика вращающегося слоя идеальной электропроводной несжимаемой жидкости // Вычислительная математика и математическая физика. 2008. Т. 48, № 5. С. 882–898.
6. Иванисов А. В., Полищук В. К. Метод нахождения корней полиномов, сходящийся при любом начальном приближении // Вычислительная математика и математическая физика. 1985. Т. 25, № 5. С. 643–653.
7. Шамин Р. В. Машинное обучение в задачах экономики. М.: Грин Принт, 2019. 140 с.

MSC2020 86-10

Mathematical modeling of geophysical processes in a layer of an electrically conducting liquid of variable depth

V. K. Kazankov, S. E. Kholodova
ITMO University

Abstract: The boundary value problem of magnetic hydrodynamics is considered, which in the approximation of long waves of small amplitude is reduced to the integration of a single scalar equation for a modified function describing the perturbation of the free surface of a liquid layer. The solution of the obtained dispersion equation is reduced to the search for the roots of a polynomial of the sixth degree with complex coefficients. The article discusses a numerical method and an algorithm created on the basis of machine learning and an iterative numerical method that allows you to find different roots of a given polynomial. The analysis of the dependence of the solution on the Coriolis parameter, the wave number and the magnetic Reynolds number, which allow us to qualitatively and numerically assess the dynamics of the process, is carried out.

Keywords: magnetic hydrodynamics of a rotating fluid, partial differential equations, mathematical modeling, magnetic Reynolds number.

References

1. K. K. Zhang, F. H. Busse. Generation of magnetic fields by convection in a rotating spherical fluid shell of infinite Prandtl number. *J. Phys. Earth Planet. Inter.* 1990. Vol. 59., Issue 3. pp. 208–222.
2. G.A. Glatzmaier, P.H. Roberts. Computer simulations of Earth's magnetic field. *Geowissenschaften.* 1997. Vol. 15. pp. 95-99.
3. S. Peregudin, E. Peregudina, S Kholodova. On integration of the system of MHD equations modeling wave processes in a rotating liquid with arbitrary magnetic Reynolds number. *Journal of Physics: Conference Series.* 2019. Vol. 1268, No. 1. pp. 012055.
4. S. Peregudin, E. Peregudina, S. Kholodova. The influence of dissipative effects on dynamic processes in a rotating electrically conductive liquid medium. *Journal of Physics: Conference Series.* 2019. Vol. 1359, No 1. pp. 012118.
5. C. E. Kholodova. Dynamics of a rotating layer of an ideal electrically conductive incompressible fluid. *Computational mathematics and mathematical physics.* 2008. Vol. 48, No. 5. pp. 882-898. (In Russ.)
6. A. V. Ivanisov, V. K. Polishchuk. A method for finding the roots of polynomials converging at any initial approximation. *Computational Mathematics and Mathematical Physics.* 1985. Vol. 25, No 5. pp. 643-653. (In Russ.)
7. R. V. Shamin. *Mashinnoe obuchenie v zadachakh ekonomiki*, ["Machine learning in economic problems"]. M.: Green Print, 2019. 140 p. (In Russ.)

УДК 51-74+665.64

Применение 16-компонентной кинетической модели каталитического крекинга для оценки активности катализаторов*

Маннанова Г. И.¹, Бикбова Г. Р.², Губайдуллин И. М.^{1,2}, Коледина К. Ф.^{1,2}

Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН¹,
Уфимский государственный нефтяной технический университет²

Аннотация: В статье представлены расчеты кинетических параметров процесса каталитического крекинга вакуумного газойля для двух различных катализаторов. Для расчетов применена разработанная авторами 16-компонентная кинетическая модель каталитического крекинга, с помощью которой можно оценивать количественные и качественные показатели целевых и побочных продуктов процесса: бензина, пропан-пропиленовой и бутан-бутиленовой фракций, легких и тяжелых каталитических газойлей. Для решения прямой задачи, представляющей собой задачу Коши для системы обыкновенных дифференциальных уравнений, применен метод Рунге-Кутты 4 порядка, для решения обратной задачи, заключающейся в подборе констант скорости химических превращений, использован метод прямого поиска минимального значения суммы отклонений расчетных концентраций от экспериментальных. Энергия активации определена по уравнению Аррениуса. В результате расчетов приведены кинетические параметры: константы скоростей реакций, энергии активации для процесса каталитического крекинга с применением двух катализаторов, а также их сравнение.

Ключевые слова: катализатор, каталитический крекинг, кинетическая модель, константа скорости реакции, прямая и обратная задача кинетики, энергия активации.

1. Введение

Каталитический крекинг является важнейшим процессом получения компонентов бензина. В нефтепереработке применением данного процесса увеличивают глубину переработки нефти за счет вовлечения в процесс тяжелых фракций. Катализатор характеризуется высоким октановым числом, малым содержанием ароматических соединений [1]. Кроме того, продуктами процесса являются компоненты сырья для нефтехимических процессов: пропан-пропиленовая и бутан-бутиленовая фракции, а также компоненты дизельных топлив. В связи с этим моделирование процесса каталитического крекинга и оценка активности катализаторов являются актуальными задачами.

2. Разработка кинетической модели

Ранее авторами была проведена работа по изучению и анализу опубликованных в отечественной и зарубежной литературе существующих моделей процесса каталитического крекинга [2]. В зависимости от назначения существующие модели имеют ряд преимуществ

*Работа выполнена по теме «Разработка новых теоретических подходов и программного обеспечения для моделирования сложных химических процессов и поиска соединений с заданными физико-химическими свойствами» (Регистрационный номер: АААА-А19-11902290011-6)

и недостатков. Некоторые модели содержат малое число компонентов и могут быть легко рассчитаны, но не позволяют оценить качество получаемых продуктов. Самые простые модели позволяют оценить лишь количество целевого продукта – бензина каталитического крекинга. Более сложные модели являются более трудоемкими в расчете. Например, в работе [3] описана одиннадцатикомпонентная модель, описывающая реакции крекинга каждой из групп углеводородов. Однако бензин представлен лишь одним компонентом, что затрудняет определение качественных показателей продукта, таких как октановое число, содержание олефиновых и ароматических углеводородов. Авторами проведена работа по разработке модели, позволяющей учесть не только количественные, но и качественные показатели бензина (его компонентный состав), а также выход ценных попутных продуктов: пропан-пропиленовая и бутан-бутиленовая фракции, компонент дизельного топлива. В ходе исследования были разработаны несколько моделей [4-6]. Основным результатом работы является новая 16-компонентная модель [7].

3. 16-компонентная кинетическая модель

Исследование 16-компонентной модели позволяет оценить количество и состав получаемого бензина каталитического крекинга, выход ценного для нефтехимических производств сырья – пропан-пропиленовой и бутан-бутиленовой фракций, а также количественные и качественные показатели фракции легкого каталитического газойля, являющегося компонентом дизельного топлива.

Схема превращений, используемая в предложенной модели, приведена на рис. 1. В таблице 1 приведены обозначения.

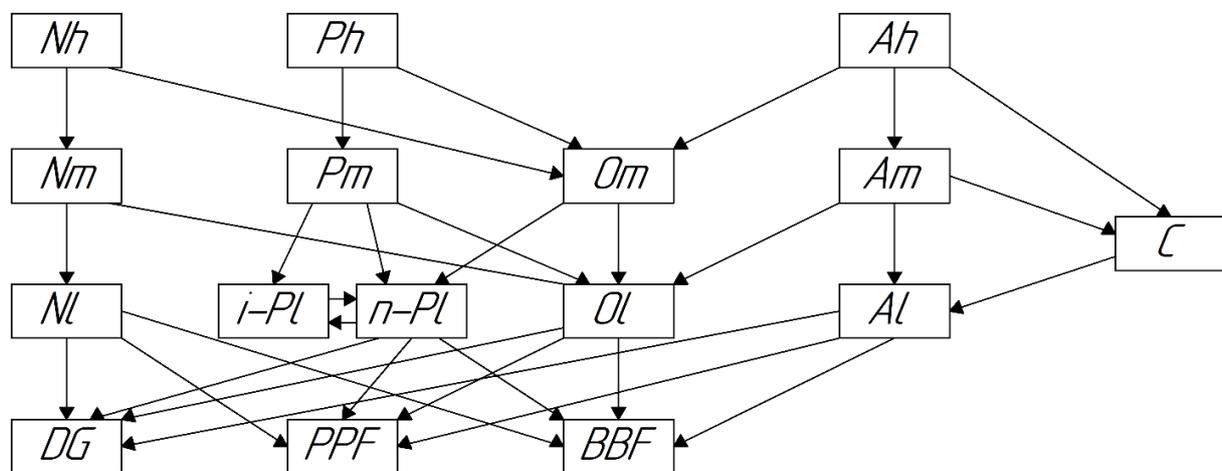


Рис. 1. 16-компонентная кинетическая модель

Отметим, что тяжелые углеводороды входят в состав сырья процесса каталитического крекинга – вакуумного газойля, а также в состав продукта – тяжелого каталитического газойля. Углеводороды средней массы образуют легкий каталитический газойль, являющийся компонентом дизельного топлива, а легкие углеводороды образуют бензин каталитического крекинга.

Таблица 1. Обозначения в кинетической модели каталитического крекинга

Обозначение	Компонент	Средняя молекулярная масса, кг/кмоль
Nh, y_1	Тяжелые нафтены ($C_{24}-C_{40}$)	400
Ph, y_2	Тяжелые парафины ($C_{24}-C_{40}$)	400
Ah, y_3	Тяжелая ароматика ($C_{24}-C_{40}$)	400
Nm, y_4	Средние нафтены ($C_{13}-C_{23}$)	200
Pm, y_5	Средние парафины ($C_{13}-C_{23}$)	200
Om, y_6	Средние олефины ($C_{13}-C_{23}$)	200
Am, y_7	Средняя ароматика ($C_{13}-C_{23}$)	200
Nl, y_8	Легкие нафтены (C_5-C_{12})	100
i-Pl, y_9	Легкие изопарафины (C_5-C_{12})	100
Al, y_{10}	Легкая ароматика (C_5-C_{12})	100
Ol, y_{11}	Легкие олефины (C_5-C_{12})	100
C, y_{12}	Смолы + кокс	-
DG, y_{13}	Жирный газ	16
PPF, y_{14}	Пропан-пропиленовая фракция	43
BBF, y_{15}	Бутан-бутиленовая фракция	57
n-Pl, y_{16}	Легкие нормальные парафины (C_5-C_{12})	100

Кинетическая модель процесса описывается системой обыкновенных дифференциальных уравнений:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d[y_1]}{dt} = -k_1[y_1] - k_8[y_1] \\ \frac{d[y_2]}{dt} = -k_2[y_2] - k_9[y_2] \\ \frac{d[y_3]}{dt} = -k_3[y_3] - k_{10}[y_3] - k_{15}[y_3] \\ \frac{d[y_4]}{dt} = k_1[y_1] - k_4[y_4] - k_{11}[y_4] \\ \frac{d[y_5]}{dt} = k_2[y_2] - k_5[y_5] - k_{12}[y_5] - k_{30}[y_5] \\ \frac{d[y_6]}{dt} = k_3[y_3] - k_6[y_6] - k_{13}[y_6] - k_{16}[y_6] \\ \frac{d[y_7]}{dt} = k_8[y_1] + k_9[y_2] + k_{10}[y_3] - k_7[y_7] - k_{14}[y_7] \\ \frac{d[y_8]}{dt} = k_4[y_4] - k_{18}[y_8] - k_{19}[y_3] - k_{20}[y_8] \\ \frac{d[y_9]}{dt} = k_5[y_5] + k_{14}[y_7] - k_{21}[y_9] - k_{22}[y_9] - k_{23}[y_9] - k_{32}[y_9] + k_{31}[y_{16}] \\ \frac{d[y_{10}]}{dt} = k_6[y_6] - k_{17}[y_{10}] - k_{24}[y_{10}] - k_{25}[y_{10}] - k_{26}[y_{10}] \\ \frac{d[y_{11}]}{dt} = k_{11}[y_4] + k_{12}[y_5] + k_{13}[y_6] + k_7[y_7] - k_{27}[y_{11}] - k_{28}[y_{11}] - k_{29}[y_{11}] \\ \frac{d[y_{12}]}{dt} = k_{15}[y_3] + k_{16}[y_6] + k_{17}[y_{10}] \\ \frac{d[y_{13}]}{dt} = k_{18}[y_8] + k_{21}[y_9] + k_{24}[y_{10}] + k_{27}[y_{11}] \\ \frac{d[y_{14}]}{dt} = k_{19}[y_8] + k_{22}[y_9] + k_{25}[y_{10}] + k_{28}[y_{11}] \\ \frac{d[y_{15}]}{dt} = k_{20}[y_8] + k_{23}[y_9] + k_{26}[y_{10}] + k_{29}[y_{11}] \\ \frac{d[y_{16}]}{dt} = k_{30}[y_5] - k_{31}[y_{16}] + k_{32}[y_9] \end{array} \right. \quad (1)$$

Здесь y_i – текущая концентрация i -го компонента в смеси (нумерация компонентов приведена в таблице 1), k_j – константа j -ой реакции (нумерация реакций приведена ниже в таблицах 2-4).

Разделение легких парафинов на парафины нормального и изо-строения позволит оценить октановое число, так как оно напрямую зависит от структуры углеродной цепи: изо-парафины имеют высокое октановое число, тогда как парафины нормального строения – низкое [8].

4. Результаты расчетов для 16-компонентной модели

В работе приведен расчет параметров кинетической модели и сравнение активности катализаторов, применяемых на двух установках каталитического крекинга на разных заводах.

На основе производственных данных из статьи [9], которые относятся к секции С-200 на установке каталитического крекинга КТ-1/1 ОАО «Газпромнефть-ОНПЗ», был произведен расчет констант скоростей реакций при разных температурах, после чего были оценены энергии активации элементарных стадий процесса.

Расчеты проводились с применением программного обеспечения МАТЛАВ. Для решения задачи Коши (прямой задачи) использовался метод Рунге-Кутты 4 порядка. Константы скоростей реакций находились из условия минимума функции:

$$z(k_1 \dots k_{32}) = \sum_{i=1}^{16} |y_i - y_{exp\ i}| \quad (2)$$

где $y_{exp\ i}$ – значение концентрации компонентов в реакционной смеси, полученных из производственных данных. Для поиска минимума данной функции (решения обратной задачи кинетики) применялся метод прямого поиска [10, 11]. Методы прямого поиска отличаются тем, что в них направление движения к оптимуму определяется только по значениям

целевой функции, т. е. не используются производные функции. Все они являются алгоритмами исследования образца, порождающими последовательность точек, приближающихся к минимуму. На каждом шаге определяется набор точек вокруг текущей точки, называемый окружением или петлей. Точки окружения образуются добавлением к текущей точке произведения скаляра на векторы, совокупность которых и называют шаблоном или образцом. Если в окружении находится точка с меньшим значением целевой функции, чем в текущей точке, она становится текущей для следующего шага алгоритма. Алгоритм для создания окружения использует векторы фиксированных направлений, например, $2N$ положительный базис, содержащий N векторов единичной матрицы размера $N \times N$ и N векторов противоположного знака, где N – число независимых переменных в целевой функции. Упомянутый выше скаляр, используемый для формирования окружения, называется размером окружения и обозначается d^m . Если x^k – текущая точка, а y^1 – точка ее окружения, то она находится по формуле:

$$y^i = x^k + d^m v_i, i = 1, \dots, 2N \text{ или } i = 1, \dots, N + 1. \quad (3)$$

На каждом шаге алгоритм обходит точки окружения, вычисляя в них значение целевой функции. Если среди них окажется точка со значением целевой функции меньше, чем у текущей точки, она становится новой текущей, а обход считается успешным. Обход прекращается, как только найдена точка с лучшим, чем у текущей точки, значением целевой функции, и такая точка становится новой текущей. При неуспешном обходе текущая точка не изменяется. На каждой итерации размер окружения изменяется: при успешном обходе он умножается на коэффициент расширения, при неуспешном – на коэффициент сужения (например, 2 и 0.5 соответственно). Алгоритм завершает работу при выполнении одного или нескольких критериев окончания, значения которых можно изменять через функцию установки параметров поиска.

Энергия активации рассчитывается согласно уравнению Аррениуса:

$$k = k_0 \exp\left(\frac{E_a}{RT}\right), \quad (4)$$

где k – константа равновесия, s^{-1} , k_0 – предэкспоненциальный множитель, s^{-1} , E_a – энергия активации, ккал/(моль · К), T – температура, К, R – газовая постоянная, ккал/моль.

Результаты расчетов констант равновесия приведены в таблице 2, расчетные значения энергии активации – в таблице 4.

На основе производственных данных, которые относятся к установке каталитического крекинга ОАО «Газпром нефтехим Салават», был произведен расчет констант скоростей реакций при разных температурах, после чего были оценены энергии активации.

Результаты расчетов констант равновесия приведены в таблице 3, расчетные значения энергии активации – в таблице 4.

Таблица 2. Расчетные значения констант скоростей химических реакций процесса каталитического крекинга, Омский НПЗ

№	Реакция	Константа k , с ⁻¹ при 500°C	Константа k , с ⁻¹ при 522°C	№	Реакция	Константа k , с ⁻¹ при 500°C	Константа k , с ⁻¹ при 522°C
1	Nh-Nm	1.4880	4.7831	19	Nl-PPF	0.0508	0.0947
2	Ph-Pm	1.6741	5.8916	20	Nl-BBF	0.2699	0.6832
3	Ah-Am	0.8196	2.3777	21	Pl-DG	0.2017	0.4855
4	Nm-Nl	1.1886	7.2230	22	Pl-PPF	0.0490	0.1025
5	Pm-Pl	1.7259	6.2488	23	Pl-BBF	0.0350	0.0616
6	Am-Al	0.9966	2.9949	24	Al-DG	0.0009	0.0014
7	Om-Ol	1.5029	4.9828	25	Al-PPF	0.0009	0.0014
8	Nh-Om	0.4034	1.0159	26	Al-BBF	0.0008	0.0011
9	Ph-Om	0.0518	0.1096	27	Ol-DG	0.0490	0.1009
10	Ah-Om	0.0226	0.0375	28	Ol-PPF	0.2314	0.5736
11	Nm-Ol	1.5955	5.4524	29	Ol-BBF	0.2014	0.4887
12	Pm-Ol	0.9364	2.6251	30	Pm-nPl	0.0016	0.0026
13	Am-Ol	0.0008	0.0012	31	nPl-iPl	2.4736	9.9771
14	Om-Pl	0.9034	2.4414	32	iPl-nPl	0.5648	1.4649
15	Ah-C	0.0698	0.1509	33	nPl-DG	0.0242	0.04129
16	Am-C	0.0806	0.1785	34	nPl-PPF	0.1350	0.3134
17	Al-C	0.1993	0.4738	35	nPl-BBF	2.4244	0.0695
18	Nl-DG	0.0998	0.2291				

Таблица 3. Расчетные значения констант скоростей химических реакций процесса каталитического крекинга, ГНХС, Салават

№	Реакция	Константа k , с ⁻¹ при 500°C	Константа k , с ⁻¹ при 520°C	№	Реакция	Константа k , с ⁻¹ при 500°C	Константа k , с ⁻¹ при 520°C
1	Nh-Nm	0.7882	2.0401	19	Nl-PPF	0.0006	0.0010
2	Ph-Pm	0.2501	0.7271	20	Nl-BBF	0.0422	0.0987
3	Ah-Am	0.2510	0.7172	21	Pl-DG	1.2881	4.2113
4	Nm-Nl	0.7829	2.0381	22	Pl-PPF	0.5553	1.4958
5	Pm-Pl	0.0441	0.0985	23	Pl-BBF	1.0298	3.4227
6	Am-Al	0.2490	0.7488	24	Al-DG	3.5343	12.5130
7	Om-Ol	1.3346	4.2309	25	Al-PPF	2.7092	8.9193
8	Nh-Om	0.2650	0.7238	26	Al-BBF	3.8750	14.4674
9	Ph-Om	0.8066	2.0477	27	Ol-DG	0.0231	0.0566
10	Ah-Om	0.1293	0.3971	28	Ol-PPF	0.0451	0.0962
11	Nm-Ol	0.3481	0.9579	29	Ol-BBF	0.0035	0.0066
12	Pm-Ol	0.9401	2.3375	30	Pm-nPl	0.0051	0.0095
13	Am-Ol	0.0757	0.1535	31	nPl-iPl	3.5333	12.1642
14	Om-Pl	0.0002	0.0004	32	iPl-nPl	0.0027	0.0052
15	Ah-C	0.0002	0.0003	33	nPl-DG	3.8386	15.0818
16	Am-C	0.0100	0.0251	34	nPl-PPF	3.4770	11.6317
17	Al-C	1.3528	4.2217	35	nPl-BBF	3.8095	13.8525
18	Nl-DG	0.1767	0.5501				

Таблица 4. Расчетные значения энергий активаций (ккал/моль · К) химических реакций процесса каталитического крекинга

№	Реакция	E_a , Омский НПЗ	E_a , ГХНС Салават	№	Реакция	E_a , Омский НПЗ	E_a , ГХНС Салават
1	Nh-Nm	145,1786	116.2619	19	Nl-PPF	80.1129	64.5642
2	Ph-Pm	156,3636	129.5487	20	Nl-BBF	116.8384	101.3442
3	Ah-Am	132.8918	127.4325	21	Pl-DG	110.8221	145.2705
4	Nm-Nl	166.6281	116.9618	22	Pl-PPF	94.3753	120.8539
5	Pm-Pl	159.8797	95.9356	23	Pl-BBF	73.3645	147.1003
6	Am-Al	137.1232	133.6737	24	Al-DG	54.7007	155.8576
7	Om-Ol	149.0194	141.5264	25	Al-PPF	58.6635	146.7365
8	Nh-Om	115.8556	125.2789	26	Al-BBF	50.6081	162.4363
9	Ph-Om	95.8317	113.8992	27	Ol-DG	92.6049	106.5227
10	Ah-Om	66.2303	135.6849	28	Ol-PPF	114.3668	90.2752
11	Nm-Ol	152.7455	123.0865	29	Ol-BBF	111.8452	74.8527
12	Pm-Ol	128.5119	111.4897	30	Pm-nPl	62.5042	71.5189
13	Am-Ol	46.3767	84.3387	31	nPl-iPl	173.0303	152.4299
14	Om-Pl	123.9727	57.1877	32	iPl-nPl	119.2621	78.0976
15	Ah-C	98.4113	49.3350	33	nPl-DG	69.8484	168.6774
16	Am-C	101.2162	109.0315	34	nPl-PPF	106.6438	148.9029
17	Al-C	109.2716	139.6102	35	nPl-BBF	76.7843	159.1914
18	Nl-DG	105.5770	137.6634				

Для оценки активности катализаторов, посчитаны конверсия, селективность по бензину и выход бензина. Результаты расчетов приведены в таблице 5.

Из расчетов, можно сделать вывод, что катализатор, применяемый на Омском НПЗ эффективнее катализатора, применяемого на заводе ГХНС-Салават, в диапазоне температур 500-522°С.

Таблица 5. Расчетные значения показателей активности катализаторов процесса каталитического крекинга

Показатель	Омский НПЗ, 500°C	ГХНС Салават, 500°C	Омский НПЗ, 522°C	ГХНС Салават, 520°C
Конверсия, %	0.91	0.73	0.92	0.67
Селективность по бензину, %	0.52	0.47	0.53	0.44
Выход бензина, %	0.48	0.35	0.43	0.30

5. Заключение

Таким образом, результатом сравнительного анализа является вывод об адекватности разработанной 16-компонентной модели кинетики каталитического крекинга. Показано, что данную модель можно применять для расчета процесса каталитического крекинга при разных условиях и при разных катализаторах. Следует отметить, что каждый катализатор характеризуется своим набором констант скоростей химических реакций и энергий активаций, по которым можно рассчитать состав реакционной смеси в любой момент времени, при любом составе сырья и при любой температуре. Данная модель позволяет оценить качество и количество получаемых продуктов процесса каталитического крекинга без проведения лабораторных опытов или промышленных пробегов.

Литература

1. Кондрашев Д. О. Развитие технологии каталитического крекинга: от неподвижного к псевдооживленному слою // Нефтепереработка и нефтехимия. 2018. № 6. С. 3-9.
2. Исламова Г.И., Губайдуллин И.М. Обзор и анализ математических моделей процесса каталитического крекинга // Марчюковские научные чтения – 2019: Тезисы Международной конференции "Актуальные проблемы вычислительной и прикладной математики" Новосибирск: ИПЦ НГУ, 2019. С. 126-127.
3. Барбоса А.С., Лопес Г.С. Трехмерное моделирование реакций каталитического крекинга в реакторе промышленного масштаба с использованием 11-компонентной кинетической модели // Расчеты в химической инженерии. № 32. 2013. С.637-642.
4. Маннанова Г.И., Губайдуллин И.М., Коледина К.Ф. Тринадцатикомпонентная кинетическая модель процесса каталитического крекинга // Уфимская осенняя математическая школа: Сборник тезисов Международной научной конференции. 2019. С. 142–144.
5. Маннанова Г.И., Губайдуллин И.М., Бикбова Г.Р. Разработка четырнадцатикомпонентной кинетической модели каталитического крекинга // Математическое моделирование процессов и систем: Материалы IX Международной молодежной научно-практической конференции. 2019. С. 235-240.
6. Маннанова Г.И., Губайдуллин И.М., Коледина К.Ф. Внутренний параллелизм при решении обратной задачи кинетики процесса каталитического крекинга вакуумного

- газойля // В сборнике: Параллельные вычислительные технологии (ПаВТ'2020). Короткие статьи и описания плакатов. 2020. С. 205-210.
7. Бикбова Г.Р., Губайдуллин И.М., Маннанова Г.И. Шестнадцатикомпонентная кинетическая модель процесса каталитического крекинга // В книге: Уфимская осенняя математическая школа – 2020. Сборник тезисов международной научной конференции. В 2-х ч. Уфа, 2020. С. 173-176.
 8. Смышляева Ю.А., Иванчина Э.Д., Кравцов А.В., Зыонг Ч.Т., Фан Ф. Разработка базы данных по октановым числам для математической модели процесса компаундирования товарных бензинов // Известия томского политехнического университета. 2011. № 3. С. 75-80.
 9. Иванчина Э.Д., Ивашкина Е.Н., Назарова Г.Ю., Стебенева В.И., Шафран Т.А., Киселева С.В., Храпов Д.В., Короткова Н.В., Есипенко Р.В. Разработка кинетической модели процесса каталитического крекинга // Катализ в нефтеперерабатывающей промышленности. 2017. № 6. С. 477-486.
 10. Коледина К.Ф., Коледин С.Н., Губайдуллин И.М. Многоцелевая оптимизация условий проведения каталитической реакции с базой данных целевых функций // Математическое моделирование процессов и систем: Материалы VIII Международной молодежной научно-практической конференции. 2018. С. 15-18.
 11. Коледин С.Н., Габитов С.А., Коледина К.Ф., Губайдуллин И.М. Информационная система оптимизации констант скоростей каталитической реакции с выбором параметров // Математическое моделирование процессов и систем: Материалы VIII Международной молодежной научно-практической конференции. 2018. С. 19-22.

MSC2020 92E20

Application of a 16-component kinetic model of catalytic cracking to evaluate the activity of catalysts

G. I. Mannanova¹, G. R. Bikbova², I. M. Gubaydullin^{1,2}, K. F. Koledina^{1,2}

Institute of Petrochemistry and Catalysis of the Russian Academy of Sciences¹,
Ufa State Petroleum Technological University²

Abstract: This article presents calculations of the kinetic parameters of the process of catalytic cracking of vacuum gas oil for two different catalysts. For calculations, a 16-component kinetic model of catalytic cracking developed by the authors is used, with the help of which it is possible to estimate the quantity and quality indicators of the target and by-products of the process: gasoline, propane-propylene and butane-butylene fractions, light and heavy catalytic gas oils. To solve the direct problem, which is a Cauchy problem for a system of differential equations, the Runge-Kutta method of 4 orders is applied, to solve the inverse problem, which consists in selecting the rate constants of chemical transformations, the method of direct search for the minimum value of the sum of deviations of calculated concentrations from experimental ones is used. The activation energy was determined by the Arrhenius equation. As a result of the calculations, the kinetic parameters are given: the constants of the reaction rates, the activation energies for the process of catalytic cracking using two catalysts, as well as their comparison.

Keywords: activation energy, catalytic cracking, catalyst, direct and inverse kinetics problem, kinetic model, reaction rate constant

References

1. D.O. Kondrashov. Development of catalytic cracking technology: from a stationary to a fluidized bed. Oil refining and petrochemistry. 2018. No. 6. pp. 3-9.
2. G.I. Islamova, I.M. Gubaydullin. Review and analysis of mathematical models of the catalytic cracking process. Marchuk scientific readings – 2019. pp. 126-127.
3. A.C. Barbosa, G.C. Lopes. Three dimensional simulation of catalytic cracking reactions in an industrial scale riser using a 11-lump kinetic. Chemical engineering transactions. 2013. Vol. 32. pp. 637-642.
4. G.I. Mannanova, I.M. Gubaydullin, K.F. Koledina. 13-lump kinetic model of the catalytic cracking process. Ufa Autumn Mathematical School: Collection of abstracts of the International Scientific Conference. 2019. pp. 142-144.
5. G.I. Mannanova, I.M. Gubaydullin, G.R. Bikbova. Development of a fourteen-component kinetic model of catalytic cracking. Mathematical modeling of processes and systems: Materials of the IX International Youth Scientific and Practical Conference. 2019. pp. 235-240.
6. G.I. Mannanova, I.M. Gubaydullin, K.F. Koledina. Internal parallelism in solving the inverse problem of the kinetics of the process of catalytic cracking of vacuum gas oil. In the collection: Parallel Computing Technologies. Short articles and poster descriptions. 2020. pp. 205-210.

7. G.R. Bikbova, I.M. Gubaydullin, G.I. Mannanova. A sixteen-component kinetic model of the catalytic cracking process. In the book: Ufa Autumn Mathematical School-2020. Collection of abstracts of the international scientific conference. 2020. pp. 173-176.
8. Yu.A. Smyshlyaeva, E.D. Ivanchina, A.V. Kravtsov, C.T. Zyong, F. Fan. Development of an octane number database for a mathematical model of the compounding process of commercial gasoline. *Izvestiya Tomsk Polytechnic University*. 2011. Vol. 3. pp. 75-80.
9. E.D. Ivanchina, E.N. Ivashkina, G.Yu. Nazarova, V.I. Stebneva, T.A. Shafran, S.V. Kiseleva, D.V. Khrapov, N.V. Korotkova, R.V. Yesipenko. Development of a kinetic model of the catalytic cracking process. *Catalysis in the oil refining industry*. 2017. Vol. 6. pp. 477-486.
10. K.F. Koledina, S.N. Koledin, I.M. Gubaydullin. Multi-purpose optimization of conditions for conducting a catalytic reaction with a database of objective functions. *Mathematical modeling of processes and systems: Materials of the VIII International Youth Scientific and Practical Conference*. 2018. pp. 15-18.
11. S.N. Koledin, S.A. Gabitov, K.F. Koledina, I.M. Gubaydullin. Information system for optimizing the rate constants of a catalytic reaction with a choice of parameters. *Mathematical modeling of processes and systems: Materials of the VIII International Youth Scientific and Practical Conference*. 2018. pp. 19-22.

УДК 532.5.032:541.182

Гидродинамический механизм перемещения микро-/наномотора с магнитным приводом*

Мартынов С. И., Ткач Л. Ю.

Сургутский государственный университет¹

Аннотация: Рассмотрен гидродинамический механизм перемещения модели микро-/наномотора с магнитным приводом. Мотор представляет собой цепочку из трех сферических частиц разного размера с электрическим зарядом, удерживающим их вместе. Общий заряд системы равен нулю. Одна или две крайние частицы в цепочке обладают магнитным моментом. Цепочка находится в вязкой жидкости и на нее действует вращающееся магнитное поле. В отсутствие внешнего поля частицы находятся в равновесии, что соответствует минимальной энергии взаимодействия. После включения вращающегося магнитного поля частицы с магнитным моментом начинают вращаться, образуя поток в окружающей вязкой жидкости. Течение жидкости вызывает гидродинамическую силу, которая перемещает цепочку в определенном направлении. Проведено численное моделирование динамики шести модельных цепочек с одной вращающейся частицей и одной цепочки с двумя вращающимися частицами. В расчетах учитывается действие на частицы внешнего момента от вращающегося магнитного поля, сил гидродинамического взаимодействия частиц друг с другом, а также внутренних сил, удерживающие частицы вместе. Определены параметры магнитного поля и структуры цепочки для наиболее быстрого ее перемещения. Предложенный механизм перемещения цепочки может быть использован для проектирования микро-/наномоторов и управления ими до места доставки полезной нагрузки.

Ключевые слова: численное моделирование, вязкая жидкость, микро-/наномотор, гидродинамическое взаимодействие, энергия взаимодействия, магнитное поле.

1. Введение

Результаты исследования динамики самодвижущихся частиц в жидкости, представленные в международных публикациях за последнее десятилетие, представляют собой часть обширных и интенсивно проводимых исследований неравновесных систем с активными частицами, находящихся в неравновесном состоянии вследствие воздействия внешних полей (электрических или магнитных), химических реакций или гидродинамических течений. Существующие нанотехнологии позволяют создавать разного рода синтетические самодвижущиеся частицы [1]. Системы с такими частицами демонстрируют возможность динамической самосборки, как результат коллективного поведения активных частиц в условиях неравновесного состояния [2]. Одной из выявленных проблем при применении активных частиц на основе каталитической реакции на ее поверхности является недостаточная их управляемость. В этом смысле активация частиц внешним полем (магнитным или электрическим) имеет преимущество, что показывают исследования [4, 5].

Во всех случаях движение наномотора происходит в вязкой жидкости, что требует более полного понимания гидродинамических процессов, происходящих при активации частиц. Например, в работах [6–8] результаты моделирования показали, что уравнения электрогидродинамики (континуальная модель), используемые в литературе [9, 10] для описания

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект No 18-41-86002/18)

электрофоретического механизма, не корректно учитывают гидродинамику окружающей жидкости за счет движения заряженных частиц в ней, и, следовательно, дают не корректный результат динамики каталитических микро-/наномоторов. Авторами предложен гидродинамический механизм, формирующий поток в окружающей жидкости, который перемещает наномотор в заданном направлении.

В работе [11] рассматривались системы заряженных или дипольных частиц, суммарный заряд или магнитный момент которых равен нулю, движущихся в результате действия гидродинамической силы, создаваемой потоком окружающей вязкой жидкости за счет относительного движения частиц системы во внешнем поле. Ниже моделируется динамика системы частиц с гибридными свойствами агрегатов заряженных и дипольных частиц, рассмотренных в [11].

2. Постановка задачи и метод решения

Искусственный магнитный микромотор, представляющий собой цепную структуру суперпарамагнитных частиц, покрытых стрептавидином, образованным вдоль приложенного постоянного магнитного поля, рассматривался в статье [12]. Частицы соединены двухцепочечной дезоксирибонуклеиновой кислотой (ДНК) с биотином на каждом конце (биотин и стрептавидин являются взаимными белками, которые образуют прочные связи). Цепь присоединяется к полезной нагрузке и движется в переменном магнитном поле, перпендикулярном приложенной постоянной.

В настоящей работе моделируется динамика агрегата, представляющего собой цепочку из трех заряженных частиц. Центральная частица имеет электрический заряд, который по величине равен сумме зарядов крайних частиц, но имеет другой знак. Система в целом не имеет заряда и находится в состоянии устойчивого равновесия благодаря действию неэлектрических сил. Подобные системы частиц были рассмотрены в статье [11]. Различие состоит в том, что одна или две частицы, расположенные вокруг центральной, должны иметь дипольный магнитный момент. Таким образом, рассматриваемая система является своего рода гибридной структурой, которая имеет сходство как с цепной структурой из [11], так и со структурой из [12].

Рассмотрим 3 твердых сферических частицы, помещенных в несжимаемую жидкость плотности ρ и вязкость η . Частицы могут иметь произвольный радиус и разную плотность. Предполагается, что силы взаимодействия (притяжение и отталкивание) действуют между частицами, удерживая их в равновесном положении, в котором потенциальная энергия взаимодействия U минимальная. Будем считать энергию частиц в агрегате U как сумму энергий парных взаимодействий частиц с номерами i и j :

$$U = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N U_{ij}, \quad i \neq j$$

Здесь необходимо отметить следующее. Как указано в работе [11], при учете энергии взаимодействия большого числа частиц возникает проблема, аналогичная случаю гидродинамического взаимодействия [13]: при сложении сил парных взаимодействий, имеющих вид пропорциональный r^{-n} , где $n \leq 3$, получаем расходящиеся ряды для большого числа взаимодействующих частиц. И хотя для определения потенциала взаимодействующих частиц решается линейная задача (обычно это уравнения Пуассона или Лапласа с соответствующими граничными условиями), граничные условия для потенциала на поверхности каждой частицы являются интегральными в том смысле, что описывают суммарный вклад от взаимодействия выделенной частицы со всеми остальными. Поэтому решение задачи о

потенциальном взаимодействии трех и более частиц нельзя представить в виде суммы решений задач о взаимодействии пар частиц, где суммирование берется по всем возможным комбинациям пар из заданной конфигурации частиц. Для корректного учета такого рода сил взаимодействия для большого числа частиц необходимо найти решение уравнений в областях вне и внутри частиц с соответствующими граничными условиями. Решение этой тривиальной задачи не является целью данной работы, поэтому используется метод парных взаимодействий, дающий достаточную точность для того числа частиц в агрегате, которые будут рассмотрены ниже.

Считая, что относительное положение частиц определяется радиус-векторами \mathbf{r}_{ij} , соединяющими центры i и j частиц, из условия минимальности энергии взаимодействия следует, что в положении равновесия каждой частицы с индексом i должно выполняться равенство

$$\left(\frac{\partial U_i}{\partial \mathbf{x}}\right)_{\mathbf{r}_{ij}=\mathbf{r}_{ij}^0} = 0, \quad U_i = \sum_{j=1}^N U_{ij},$$

где \mathbf{r}_{ij}^0 – радиусы-векторы, соответствующие положению равновесия частиц в агрегате.

В настоящей работе используется метод, основанный на представлении динамики агрегата как динамики системы частиц, образующих агрегат, при учете как внутренних сил или наложенных связей, которые удерживают частицы в агрегате, так и сил гидродинамического взаимодействия между ними. Этот подход предложен в работах [13, 14] и дает хорошее согласие с экспериментальными результатами. Суть метода заключается в том, что записываются уравнения движения каждой частицы с учетом всех сил, действующим на нее со стороны всех других частиц, в том числе и силы гидродинамического взаимодействия, а также уравнения вращательного движения, с учетом моментов действующих на частицы. Система уравнений динамики системы частиц записывается в виде:

$$\mathbf{F}_k^{(i)} + \mathbf{F}_k^{(e)} + \mathbf{F}_k^{(h)} = 0, \quad \mathbf{T}_k^{(i)} + \mathbf{T}_k^{(e)} + \mathbf{T}_k^{(h)} = 0. \quad (1)$$

Здесь $\mathbf{F}_k^{(h)}$ – силы, $\mathbf{T}_k^{(h)}$ – моменты сил со стороны жидкости, $\mathbf{F}_k^{(e)}$, $\mathbf{T}_k^{(e)}$ – внешние силы и моменты сил, $\mathbf{F}_k^{(i)}$, $\mathbf{T}_k^{(i)}$ – внутренние, действующие на частицу с номером k . Причем, $\mathbf{F}_k^{(i)} = -\nabla U_k$.

Для нахождения гидродинамических сил $\mathbf{F}_k^{(h)}$ и моментов $\mathbf{T}_k^{(h)}$, действующих на частицы, решается система уравнений гидродинамики. В случае малых чисел Рейнольдса система уравнений для скорости \mathbf{u} и давления p жидкости имеет вид:

$$\nabla \mathbf{u} = 0, \quad -\nabla p + \eta \Delta \mathbf{u} = \mathbf{0}.$$

На поверхности частицы с номером k должны выполняться условия:

$$u_i = V_i^k + \Omega_{ij}^k x_j^k, \quad |\mathbf{X}^k| = a^k.$$

Здесь, введены следующие обозначения: \mathbf{V}^k – вектор абсолютной линейной скорости, Ω_{ij}^k – тензор угловой скорости, \mathbf{X}^k – вектор положения точки жидкости относительно центра частицы с номером k и радиусом a^k .

На большом расстоянии от частиц должны выполняться условия:

$$u_i \rightarrow 0, \quad p \rightarrow p_0 \quad \text{если } |\mathbf{X}| \rightarrow \infty,$$

где p_0 – невозмущенное давление в жидкости.

Для решения системы уравнений гидродинамики и определения сил \mathbf{F}_k^h и моментов \mathbf{T}_k^h использовался метод [13, 14], основанный на представлении решения уравнений гидродинамики в виде мультипольного разложения с тензорными коэффициентами и позволяющий учитывать гидродинамическое взаимодействие большого числа частиц в вязкой жидкости. Для получения корректных вычислительных результатов учитывались слагаемые с тензорными коэффициентами шестого порядка, что дало погрешность вычислений в десятые доли процента. Указанная выше погрешность получена при компьютерном моделировании, когда вместо реальных параметров задачи используются модельные. Это связано с тем, что для реальных течений Стокса размеры частиц должны быть достаточно малыми, что затрудняет нахождения численного решения системы уравнений и визуализацию результатов. Поэтому применялся метод подобия и модельные параметры. При компьютерном моделировании задаются размер частицы \hat{a} , вязкость несущей жидкости $\hat{\eta}$, величина внешней силы \hat{F} , действующей на каждую частицу, и ее направление, а также промежуток времени \hat{t} . Детально такой метод моделирования и связь между реальными и модельными параметрами представлены в работах [14].

Рассмотрим агрегат, состоящий из трех частиц: центральная частица B и две A, C , расположенных вокруг центральной на расстоянии $5.5a$, где a – характерный размер (рис. 1). Радиусы частиц A, B и C равны, соответственно, k_1a, k_2a, k_3a , где $k_i, i = 1, 2, 3$ – коэффициенты, характеризующие масштаб частиц.

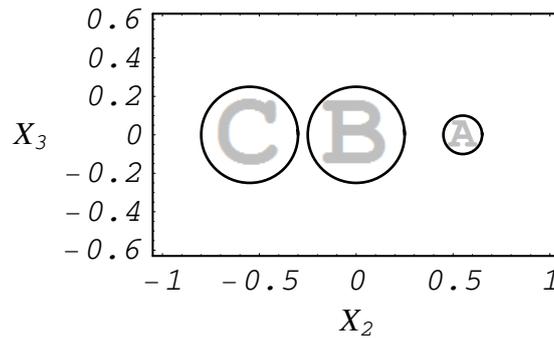


Рис. 1. Структура агрегата

Заряд частицы B положителен и равен по величине $2q$, где q – отрицательный заряд у каждой из двух других частиц, то есть агрегат в целом заряжен нейтрально. Энергия взаимодействия частиц в агрегате складывается из энергии притяжения U_1 между центральной положительно заряженной частицей и каждой из двух отрицательно заряженных частиц, энергии отталкивания U_2 между отрицательно заряженными частицами и энергией отталкивания некулоновского взаимодействия U_3 между центральной и двумя другими частицами [13]. Суммарная энергия, например в точке, занимаемой частицей A , имеет вид:

$$U = U_1 + U_2 + U_3, \quad U_1 = -k \frac{2q^2}{r_{BA}}, \quad U_2 = k \frac{q^2}{r_{CA}}, \quad U_3 = \frac{\gamma}{r_{BA}^2}$$

Здесь k – коэффициент пропорциональности в законе Кулона, неизвестный коэффициент γ определяется из условия равенства нулю сил в положении устойчивого равновесия. Для указанного на рис. 1 положения частиц имеем следующие равенства:

$$r_{CA} = 2r, \quad r_{BA} = r$$

. С учетом этих соотношений выражение для силы, действующей на частицу A , примет вид:

$$F_A = k \frac{2q^2}{r^2} - k \frac{q^2}{4r^2} - \frac{2\gamma}{r^3}.$$

Поскольку в положении равновесия сила должна быть равна нулю, получаем соотношение:

$$\gamma = kq^2 \cdot 0.48125a.$$

Будем предполагать, что частица A или C имеет магнитный момент \mathbf{m} . Во вращающемся однородном магнитном поле частица A или C также начинает вращаться с угловой скоростью ω , стремясь ориентировать свой магнитный момент вдоль приложенного поля. Вращение частицы приводит в движение жидкость, которая приводит в движение другие частицы агрегата. Как результат течения в окружающей агрегат жидкости формируется гидродинамическая сила, движущая агрегат в определенном направлении. Для того чтобы агрегат двигался в направлении, вдоль которого частицы находятся в положении равновесия, необходимо периодически менять направление вращения магнитного поля.

Цель данного исследования – показать, что агрегаты рассматриваемой структуры действительно движутся в выбранном направлении под действием гидродинамической силы, создаваемой потоком окружающей жидкости в результате деформации структуры вращающемся магнитным полем. Ниже приведены результаты моделирования динамики таких агрегатов.

3. Результаты моделирования

Численно моделировалась динамика шести модельных агрегатов рассмотренной выше структуры, в которой одна частица имеет магнитный момент \mathbf{m} . Агрегаты различаются по размеру частиц A и C , размер частицы B остается тем же. Однородное магнитное поле напряженностью \mathbf{H} приложена к системе. Вектор $\mathbf{H} = (0; -H \cos(\Omega t); -H \sin(\Omega t))$ вращается в плоскости агрегата с частотой Ω . Момент $\mathbf{m} \times \mathbf{H}$, действующий на частицу A , рассматривается одинаковым для все шести модельных структур агрегатов.

Как упоминалось выше, в расчетах вместо реальных параметров задачи используются модельные. В компьютерном моделировании задаются размер частиц \hat{a} , вязкость несущей жидкости $\hat{\eta}$, величина внешнего момента \hat{M} , действующего на частицу с магнитным моментом \hat{m} и интервал времени \hat{t} .

Модельные параметры выбираются из условия, чтобы число Рейнольдса было мало: $\hat{a} = 0.1$ см, $\hat{\eta} = 1$ г/(см·сек). Размеры частиц агрегатов приведены в таблице 1.

Таблица 1. Размеры частиц агрегата.

Частица A	Частица B	Частица C
0.15 \hat{a}	0.25 \hat{a}	0.3 \hat{a}
0.1 \hat{a}	0.25 \hat{a}	0.25 \hat{a}
0.1 \hat{a}	0.25 \hat{a}	0.1 \hat{a}
0.15 \hat{a}	0.25 \hat{a}	0.1 \hat{a}
0.2 \hat{a}	0.25 \hat{a}	0.1 \hat{a}
0.25 \hat{a}	0.25 \hat{a}	0.1 \hat{a}

Вращательный модельный момент $\hat{M} = |\mathbf{m} \times \mathbf{H}|$ прикладывается к частице A во всех рассмотренных случаях модельных агрегатов. Его величина берется равной 1.5 г·см²/сек². Считается, что величина вращательного момента \hat{M} остается постоянной и максимальной.

Для этого необходимо, чтобы угол между векторами \mathbf{m} и \mathbf{H} оставался неизменным. Это возможно, когда угловая скорость частицы A и частота вращения вектора \mathbf{H} одинаковые $\omega = \Omega$. Уравнения вращения модельного и реального агрегатов записываются следующим образом:

$$8K\pi\eta a^3\omega = M, \quad 8K\pi\hat{\eta}\hat{a}^3\hat{\omega} = \hat{M}$$

Здесь, коэффициент K характеризует геометрию структуры и не зависит от размеров частиц в структуре. Магнитный момент частицы определяется, как $m = M_s 4\pi a^3 / 3$, где M_s намагниченность насыщения материала из которого сделана частица. Подставляя выражения для магнитного момента частицы в эти уравнения, получаем:

$$8K\pi\eta a^3\omega = \frac{4\pi a^3}{3} M_s H, \quad 8K\pi\hat{\eta}\hat{a}^3\hat{\omega} = \frac{4\pi\hat{a}^3}{3} M_s \hat{H}$$

Эти уравнения дают соотношения между реальными и модельными параметрами при вращении частиц:

$$\frac{\eta\omega}{\hat{\eta}\hat{\omega}} = \frac{H}{\hat{H}}.$$

Другое соотношение следует из равенства чисел Рейнольдса модельного и реального течений жидкости при вращении частиц:

$$\frac{\rho\omega a^2}{\eta} = \frac{\rho\hat{\omega}\hat{a}^2}{\hat{\eta}}. \quad (2)$$

Из последних двух равенств следует соотношение между реальным и модельным значением напряженности магнитного поля:

$$H = \frac{\eta^2 \hat{a}^2}{\hat{\eta}^2 a^2} \hat{H}. \quad (3)$$

Для ферромагнетиков намагниченность насыщения M_s равна 450 Г. Для вращающейся частицы размером $\hat{a} = 0.1$ см, получаем модельное значение напряженности равное $\hat{H} = 0.796$ Э. Изменение размера вращающейся частицы также изменяет значение магнитного поля, поскольку крутящий момент одинаков для всех рассмотренных случаев.

В предположении, что модельный заряд частиц таков, что $k\hat{q}^2 = 20/7 \cdot 10^{-13}$ Н·м², численно моделируется динамика шести модельных агрегатов описанной выше структуры, находящихся в начальный момент в положении равновесия. Вектор магнитного момента частицы A направлен вдоль оси Ox_2 . Затем, перпендикулярно этому направлению включается вращающееся магнитное поле, действующее в течении 15 сек. После этого направление вращения меняется на противоположное и действует в течении 30 сек. После этого периода вращение вновь меняется на противоположное и действует в течении 30 сек. Изменение направления вращения происходит с периодом 30 сек. Движение агрегата происходит циклично и подобен движению некоторых плавающих организмов. Подобный механизм формирует в окружающей жидкости вихревое течение, которое создает гидродинамическую силу для перемещения агрегата. Численные результаты по моделированию динамики рассматриваемых агрегатов за модельный интервал времени $\hat{T} = 30$ сек приведены в таблице 2. Параметр ϵ означает погрешность вычислений. Перемещение частицы B обозначается $\Delta\hat{l}$. Из таблицы 2 следует, что результаты существенно зависят от относительных размеров частиц.

Смещение частиц A и C немного отличается по величине от смещения частицы B , что обусловлено деформацией агрегата действием гидродинамической силы.

Как видно из табл. 2, второй агрегат движется быстрее остальных. Поскольку сумма внешних сил, действующих на частицы агрегата со стороны магнитного поля, равна нулю,

Таблица 2. Результаты моделирования.

$\hat{\omega}$, сек ⁻¹	$\Delta \hat{l}$, см	ε
59.5897	-0.01037	$7.8415 \cdot 10^{-4}$
59.4719	-0.0200737	$1.6064 \cdot 10^{-3}$
59.4741	-0.0111532	$1.3225 \cdot 10^{-3}$
17.4758	-0.0113553	$1.2619 \cdot 10^{-3}$
7.24737	-0.0117475	$1.0064 \cdot 10^{-3}$
3.58787	-0.0126628	$3.8657 \cdot 10^{-3}$

а внутренние силы не могут изменить положение центра тяжести системы частиц, то следует признать, что движение агрегатов обусловлено действием гидродинамической силы. Взаимодействие частиц приводит к течению в окружающей вязкой жидкости, которое и создает силу, движущую агрегат. Динамика второго блока показана на рис. 2-6. Другие модели агрегатов имеют аналогичную динамику.

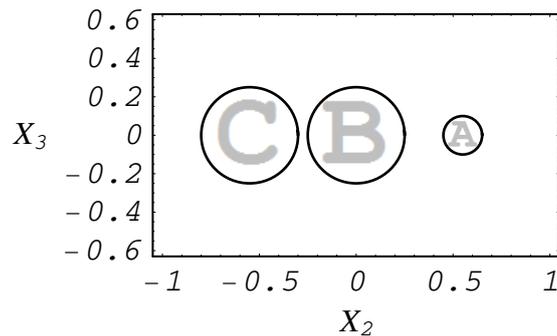


Рис. 2. Начальная положение.

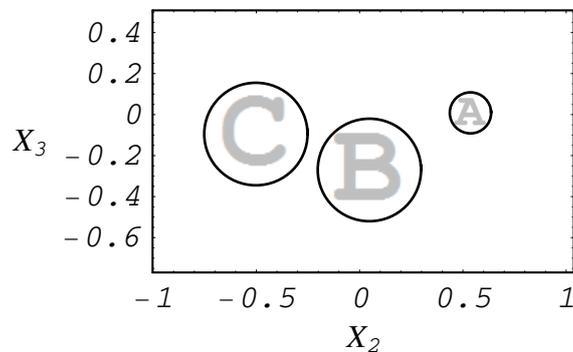


Рис. 3. Положение после 15 сек. Направление вращения магнитного поля меняется на противоположное.

Значения фактических параметров можно определить по формулам обновления, приведенным в [14]. Например, фактическое время действия магнитного поля и время релаксации

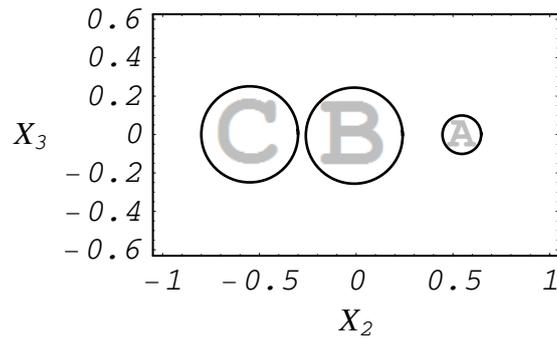


Рис. 4. Положение после 30 сек.

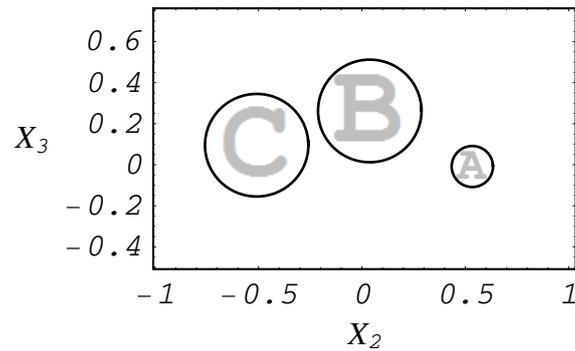


Рис. 5. Положение после 45 сек. Направление вращения магнитного поля меняется на противоположное.

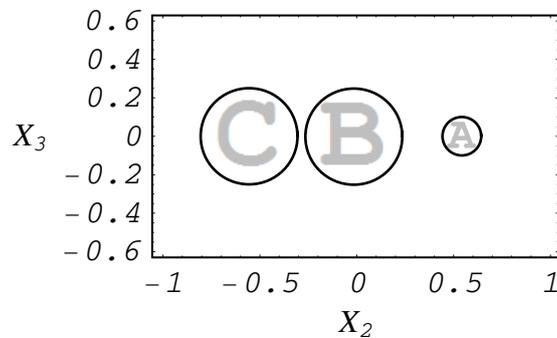


Рис. 6. Положение после 60 сек.

определяются по правилу:

$$t = \frac{a^2 \hat{\eta} \hat{t}}{\hat{a}^2 \eta}.$$

Для совокупности частиц размером $a = 10^{-4}$ см и для жидкости фактической вязкости $\eta = 10^{-2}$ Г/(см · сек), мы получаем $T = 3 \cdot 10^{-3}$ сек. Заряд частиц определяется следующим соотношением действительных и модельных сил [11]:

$$k \frac{q^2}{a^2} \hat{\eta}^2 = k \frac{\hat{q}^2}{\hat{a}^2} \eta^2.$$

С учетом выбранной модельной величины заряда $k \hat{q}^2 = 20/7 \cdot 10^{-13}$ Н · м² и $k \approx 9 \cdot 10^9$ Н · м² / Кл² получаем, что фактический фактический заряд частиц равен $q =$

$5.63 \cdot 10^{-17}$ Кл. Из соотношений (3.1) и (3.2) получаем реальные значения угловой скорости и напряженности магнитного поля: $\omega = 10^4 \hat{\omega}$, $H = 100 \hat{H}$ Э. Подставляя в модель значение скорости вращения частицы из табл. 2, мы получаем фактическую скорость вращения частиц. Для модельного значения магнитного поля $\hat{H} = 0.796$ Э получаем, что его реальная величина должна быть $H = 79.6$ Э. Значения реальной угловой скорости и силы магнитного поля могут быть уменьшены путем уменьшения приложенного момента и увеличения времени воздействия на систему.

В качестве варианта конструкции рассматривалась модель агрегата, в которой обе частицы A и C обладают магнитным моментом. Динамика такой системы была смоделирована для второго блока из табл. 1. Считалось, что частица C имеет магнитный момент \mathbf{m} . Магнитное поле действует на него с моментом, равным $M = 1.5 \text{ г}\cdot\text{см}^2/\text{сек}^2$. Магнитный момент частиц определяется произведением объема частицы и намагниченности насыщения материала, из которого состоит частица. Поскольку частица A меньше, чем C , при условии одинакового состава магнитного материала частиц, его магнитный момент равен $0.064 \mathbf{m}$. В этом случае можно предположить, что частицы вращаются с одинаковой угловой скоростью. Продолжительность и цикл действия вращающегося магнитного поля такие же, как и для агрегатов, рассмотренных выше. Перемещение частицы B равно $\Delta l = 0.0128423$ см, угловая скорость частиц A и C равны 3.69655 сек^{-1} и 3.58121 сек^{-1} соответственно. Небольшое различие в значениях угловой скорости частиц может быть объяснено различными коэффициентами K , с учетом положения этих частиц в структуре. Существенной характеристикой такого агрегата является то, что он движется в противоположном направлении в отличие от агрегатов с одной вращающейся частицей. В случае двух дипольных частиц также необходимо учитывать их энергию диполь-дипольного взаимодействия. При параллельном вращении магнитных моментов частиц энергия взаимодействия равна $U_d = m_1 m_2 (1 - 3 \cos^2 \theta) / r^3$, где θ угол между магнитным моментом \mathbf{m} и радиус-вектором \mathbf{r} , соединяющим центры частиц. За один полный оборот магнитных моментов среднее значение этой энергии равно нулю. Поэтому энергию взаимодействия между частицами и, следовательно, силы взаимодействия можно считать такими же, как в случаях одной вращающейся частицы. Следует отметить, что в случае двух вращающихся частиц движение агрегата существенно зависит от их относительного размера. В случае одинакового размера частиц A и C их вращение не приводит к смещению агрегата.

4. Заключение

Рассмотрен гидродинамический механизм перемещения агрегата из трех частиц во вращающемся магнитном поле. Частицы агрегата заряжены так, что их суммарный электрический заряд равен нулю, но в то же время они образуют устойчивую цепочку за счет энергии взаимодействия, которая определяется кулоновским взаимодействием зарядов частиц и взаимодействием неэлектрической природы. Одна или две частицы, расположенные относительно центральной частицы, имеют магнитный момент. Вращающееся магнитное поле заставляет вращаться частицы, что создает поток в окружающей вязкой жидкости. Образующийся поток в окружающей жидкости вызывает гидродинамическую силу, действующую на устройство и перемещающую его в определенном направлении. Изменяя направление вращения магнитного поля, можно управлять движением такой цепочки частиц. Гидродинамическое взаимодействие всех частиц в цепи учитывается. Компьютерное моделирование движений таких агрегатов в вязкой жидкости выполнялось с использованием специального программного пакета. Численно рассчитана динамика 6 модельных цепочек, образованных из частиц разных размеров с одной вращающейся частицей и одной модели цепочки с двумя вращающимися частицами. Результаты численного моделирования позволяют определить, какая из моделей агрегатов частиц движется с большей скоростью. Предлагаемый механизм

перемещения цепного агрегата может быть использован при конструировании синтетических нано- или микромоторов.

Литература

1. Zhang J., Grzybowski B. A., Granick S. Janus Particle Synthesis, Assembly, and Application // *Langmuir*. 2017. No. 33. DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.langmuir.7b01123>
2. Wang Q., Yang L., Wang B., Yu E., Yu J., Zhang L. Collective Behavior of Reconfigurable Magnetic Droplets via Dynamic Self-Assembly // *ACS Appl. Mater. Interfaces*. 2019. Vol. 11, No. 1. DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.langmuir.7b01123>[10.1021/acsami.8b17402](https://doi.org/10.1021/acsami.8b17402)
3. Manjare M., Yang F., Vach P.J., Walker D., Fischer P., Fratzl, P., Faivre, D. Pattern formation and collective effects in populations of magnetic microswimmers // *J. Phys. D: Appl. Phys.* 2017. Vol. 50. 11LT03. DOI:10.1088/1361-6463/aa5d36
4. Kokot G., Kolmakov G. V., Aranson I. S., Snezhko A. Dynamic self-assembly and self-organized transport of magnetic micro-swimmers // *Scientific Reports*. 2017. Vol. 7. Article number: 14726. DOI:10.1038/s41598-017-15193-z
5. Kokot G., Das S., Winkler R.G., Gompper G., Aranson I. S., Snezhko A. Active turbulence in a gas of self-assembled spinners // *PNAS*. 2017. Vol. 114, No. 49. DOI <https://doi.org/10.1073/pnas.1710188114>
6. Мартынов С. И., Ткач Л. Ю. К вопросу о механизме движения синтетических наномоторов в вязкой жидкости // *Ж. вычисл. матем. и матем. физ.* 2020. Т. 60, № 11. С. 1975–1984. URL: DOI: <https://doi.org/10.31857/S0044466920110083>
7. Мартынов С.И., Ткач Л.Ю. Модель гидродинамического механизма перемещения наномоторов // *Матем. моделирование*. 2020. Т. 32, № 12. С. 81–94. DOI: <https://doi.org/10.20948/mm-2020-12-07>
8. Мартынов С.И., Ткач Л.Ю. Гидродинамический механизм перемещения каталитических микро-/наномоторов // *Журнал Средневолжского математического общества*. 2021. Т. 23, № 1. С. 91–109. DOI: <https://doi.org/10.15507/2079-6900.23.202101.91-109>
9. Moran J. L., Wheat P. M., Posner J. D. Locomotion of electrocatalytic nanomotors due to reaction induced charge autoelectrophoresis // *Phys. Rev. E*. 2010. Vol. 81, Iss. 6. 065302. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.81.065302>
10. Moran J.L., Posner J. D. Electrokinetic locomotion due to reaction-induced charge auto-electrophoresis // *J. Fluid Mech.* 2011. Vol. 680. DOI: <https://doi.org/10.1017/jfm.2011.132>
11. Martynov S. I., Tkach L. Yu. Mechanism of moving particle aggregates in a viscous fluid // *Comput. Math. Math. Phys.* 2019. Vol. 59. DOI: <https://doi.org/10.1134/S0965542520110081>
12. Dreyfus R., Baudry J., Roper M.L., Fermigier M., Stone H.A., Bibette J. Microscopic artificial swimmers // *Nature*. 2005. Vol. 437. DOI: <https://doi.org/10.1038/nature04090>
13. Martynov S. I. Hydrodynamic interaction of particles // *Fluid Dyn.* 1998. Vol. 33, No. 2. pp. 245-251.

14. Martynov S.I., Tkach L. Yu., Simulation of particle aggregate dynamics in a viscous fluid //Comput. Math. Math. Phys. 2015. Vol. 55. pp. 282–290. DOI: <https://doi.org/10.1134/S0965542515020141>

MSC2020 76D07, 76D09, 76D17

Hydrodynamic mechanism of movement of micro-/nanomotor with magnetic drive

S. I. Martynov, L. Yu. Tkach
Surgut State University

Abstract: The hydrodynamic mechanism of movement of a model of a micro-/nanomotor with a magnetic drive is considered. The motor is a chain of three spherical particles of different sizes with an electric charge holding them together. The total charge of the system is zero. One or two extreme particles in the chain have a magnetic moment. The chain is in a viscous liquid and is acted upon by a rotating magnetic field. In the absence of an external field, the particles are in equilibrium, which corresponds to the minimum interaction energy. After turning on the rotating magnetic field, particles with a magnetic moment begin to rotate, forming a flow in the surrounding viscous fluid. The fluid flow causes a hydrodynamic force that moves the chain in a specific direction. Numerical simulation of the dynamics of six model chains with one rotating particle and one chain with two rotating particles is carried out. The calculations take into account the effect on particles of an external moment from a rotating magnetic field, the forces of hydrodynamic interaction of particles with each other, as well as internal forces that hold the particles together. The parameters of the magnetic field and the structure of the chain for the fastest movement of the chain have been determined. The proposed chain movement mechanism can be used to design micro-/nanomotors and control them to the place of payload delivery.

Keywords: numerical modeling, viscous fluid, micro-/nanomotor, hydrodynamic interaction, interaction energy, magnetic field.

References

1. J. Zhang, B. A. Grzybowski, S. Granick. Janus Particle Synthesis, Assembly, and Application. *Langmuir*. 2017. No. 33. DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.langmuir.7b01123>
2. Q. Wang, L. Yang, B. Wang, E. Yu, J. Yu, L. Zhang. Collective Behavior of Reconfigurable Magnetic Droplets via Dynamic Self-Assembly. *ACS Appl. Mater. Interfaces*. 2019. Vol. 11, No. 1. DOI: <https://doi.org/10.1021/acsami.8b17402>
3. M. Manjare, F. Yang, P.J. Vach, D. Walker, P. Fischer, P. Fratzl, D. Faivre. Pattern formation and collective effects in populations of magnetic microswimmers. *J. Phys. D: Appl. Phys.* 2017. Vol. 50. 11LT03. DOI: <https://doi.org/10.1088/1361-6463/aa5d36>
4. G. Kokot, G. V. Kolmakov, I. S. Aranson, A. Snezhko. Dynamic self-assembly and self-organized transport of magnetic micro-swimmers. *Scientific Reports*. 2017V. 7. Article number: 14726. DOI: <https://doi.org/10.1038/s41598-017-15193-z>
5. Kokot G., Das S., Winkler R.G., Gompper G., Aranson I. S., Snezhko A. Active turbulence in a gas of self-assembled spinners. *PNAS*. 2017. Vol. 114, No. 49. DOI: <https://doi.org/10.1073/pnas.1710188114>

6. S. I. Martynov, L. Yu. Tkach. ["Mechanism of locomotion of synthetic nanomotors in a viscous fluid"], *Zh. Vychisl. Mat. Mat. Fiz.* 2020. Vol. 60, No. 11. pp. 1975–1984. DOI: <https://doi.org/10.31857/S0044466920110083> (In Russ.)
7. S. I. Martynov, L. Yu. Tkach. Model of Hydrodynamic Mechanism of the Movement of Nanomotors // *Mathematical Models and Computer Simulations.* 2021. Vol. 13, No. 4. DOI: <https://doi.org/10.1134/S2070048221040153> (In Russ.)
8. S. I. Martynov, L. Yu. Tkach. Hydrodynamic mechanism of movement of catalytic micro- / nanomotors. *Zhurnal Srednevolzhskogo Matematicheskogo Obshchestva.* 2021. Vol. 23, No. 1. pp. 91-109. DOI: [10.15507/2079-6900.23.202101.91–109](https://doi.org/10.15507/2079-6900.23.202101.91-109) (In Russ.)
9. J. L. Moran, P. M. Wheat, J. D. Posner. Locomotion of electrocatalytic nanomotors due to reaction induced charge autoelectrophoresis. *Phys. Rev. E.* 2010. Vol. 81. Iss. 6. pp. 065302. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.81.065302>
10. J.L. Moran, J. D. Posner. Electrokinetic locomotion due to reaction-induced charge auto-electrophoresis. *J. Fluid Mech.* 2011. Vol. 680. DOI: <https://doi.org/10.1017/jfm.2011.132>
11. S. I. Martynov, L. Yu. Tkach. Mechanism of moving particle aggregates in a viscous fluid. *Comput. Math. Math. Phys.* 2019. Vol. 59. DOI: <https://doi.org/10.1134/S0965542520110081>
12. R. Dreyfus, J. Baudry, M.L. Roper, M. Fermigier, H.A. Stone, J. Bibette. Microscopic artificial swimmers. *Nature.* 2005. Vol. 437. DOI: <https://doi.org/10.1038/nature04090>
13. S. I. Martynov. Hydrodynamic interaction of particles. *Fluid Dyn.* 1998. Vol. 33, No. 2. pp. 245-251.
14. S.I. Martynov, L. Yu. Tkach. Simulation of particle aggregate dynamics in a viscous fluid. *Comput. Math. Math. Phys.* 2015. Vol. 55, No. 2. pp. 282–290. DOI: <https://doi.org/10.1134/S0965542515020141>

УДК 517.954

Об одной краевой задаче для дифференциального уравнения с частными производными четвертого порядка с нелокальными условиями

Мурсалова М. Б., Касумов Т. М.

Бакинский Государственный Университет

Аннотация: Исследована одна краевая задача для дифференциального уравнения с частными производными четвертого порядка с интегральным граничным условием. Вначале исходная задача сводится к эквивалентной задаче, для которой доказывается теорема существования и единственности решения. Далее с использованием этих фактов доказываются существование и единственность классического решения исходной задачи.

Ключевые слова: краевая задача, дифференциальные уравнения, существование решения, единственность решения, классическое решение.

1. Постановка задачи и её сведение к эквивалентной задаче

Математическое моделирование многих процессов, происходящих в реальном мире, приводит к изучению краевых задач для уравнений в частных производных. В настоящее время теория краевых задач является одним из важнейших разделов теории дифференциальных уравнений. С точки зрения физических приложений актуально исследование дифференциальных уравнений четвертого порядка.

Современные проблемы естествознания приводят к необходимости обобщения классических задач математической физики, а также к постановке качественно новых задач, к которым можно отнести нелокальные задачи для дифференциальных уравнений. Среди нелокальных задач большой интерес представляют задачи с интегральными условиями. Нелокальные интегральные условия описывают поведение решения во внутренних точках области в виде некоторого среднего. Такого рода интегральные условия встречаются при исследовании физических явлений в случае, когда граница области протекания процесса недоступна для непосредственных измерений. Примером могут служить задачи, возникающие при исследовании диффузии частиц в турбулентной плазме [1], процессов распространения тепла [2, 3], процесса влагопереноса в капиллярно-пористых средах [4], а также при исследовании некоторых обратных задач математической физики [7;8].

Рассмотрим уравнение

$$u_{tt}(x, t) - \alpha u_{ttxx}(x, t) + u_{xxxx}(x, t) = f(x, t) \quad (1)$$

в замкнутой области $D_T = \{(x, t) : 0 \leq x \leq 1, 0 \leq t \leq T\}$ и поставим для него краевую задачу с нелокальными начальными условиями

$$u(x, 0) + \delta u(x, T) = \varphi(x), \quad u_t(x, 0) + \delta u_t(x, T) = \psi(x) \quad (0 \leq x \leq 1), \quad (2)$$

периодическими условиями

$$u(0, t) = u(1, t), \quad u_x(0, t) = u_x(1, t), \quad u_{xx}(0, t) = u_{xx}(1, t) \quad (0 \leq t \leq T) \quad (3)$$

и нелокальным интегральным условием

$$\int_0^1 u(x, t) dx = 0 \quad (0 \leq t \leq T), \quad (4)$$

где $\delta \neq \pm 1$, $\alpha > 0$ – заданные числа, $\varphi(x)$, $\psi(x)$, $f(x, t)$ – заданные функции, а $u(x, t)$ – искомая функция.

Определение 1. Под классическим решением задачи (1)-(4) понимаем функцию $u(x, t)$, непрерывную в замкнутой области D_T вместе со всеми своими производными, входящими в уравнение (1), и удовлетворяющую условиям (1)-(4) в обычном смысле.

Справедлива следующая

Лемма 1. Пусть

$$\delta \neq \pm 1, \varphi(x) \in C[0, 1], \int_0^1 \varphi(x) dx = 0, \psi(x) \in C[0, 1], \int_0^1 \psi(x) dx = 0,$$

$$f(x, t) \in C(D_T), \int_0^1 f(x, t) dx = 0 \quad (0 \leq t \leq T).$$

Тогда задача нахождения классического решения задачи (1)-(4) эквивалентна задаче определения функций $u(x, t)$, из (1)-(3),

$$u_{xxx}(0, t) = u_{xxx}(1, t) = 0 \quad (0 \leq t \leq T), \quad (5)$$

Доказательство. Пусть $u(x, t)$ является классическим решением задачи (1)-(4). Интегрируя уравнение (1) от 0 до 1 по x , имеем:

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dt^2} \int_0^1 u(x, t) dx - \alpha(u_{ttt}(1, t) - u_{ttt}(0, t)) + u_{xxx}(1, t) - u_{xxx}(0, t) = \\ = \int_0^1 f(x, t) dx \quad (0 \leq t \leq T). \end{aligned} \quad (6)$$

Отсюда, с учётом $\int_0^1 f(x, t) dx = 0$ и (3), приходим к выполнению равенства (5).

Теперь предположим, что $u(x, t)$ является решением задачи (1)- (3), (5).

Тогда из (6), с учетом (3), (5), имеем:

$$y''(t) = 0 \quad (0 \leq t \leq T), \quad (7)$$

где

$$y(t) = \int_0^1 u(x, t) dx \quad (0 \leq t \leq T). \quad (8)$$

В силу (2) и $\int_0^1 \varphi(x) dx = 0$, $\int_0^1 \psi(x) dx = 0$, получаем:

$$\begin{aligned} y(0) + \delta y(T) &= \int_0^1 (u(x, 0) + \delta u(x, T)) dx = \int_0^1 \varphi(x) dx = 0, \\ y'(0) + \delta y'(T) &= \int_0^1 (u_t(x, 0) + \delta u_t(x, T)) dx = \int_0^1 \psi(x) dx = 0 \end{aligned} \quad (9)$$

Из (7) с учетом (9) с очевидностью получаем, что $y(t) \equiv 0$ ($0 \leq t \leq T$). Отсюда, в силу (8), приходим к выполнению равенства (4).

Лемма доказана.

Доказательство завершено.

2. Существование и единственность решения задачи

Покажем существование решения задачи (1)-(3), (5).

Рассмотрим спектральную задачу:

$$X''(x) + \lambda^2 X(x) = 0, \quad 0 \leq x \leq 1, \quad (10)$$

$$X(0) = X(1), \quad X'(0) = X'(1). \quad (11)$$

Известно [6], что собственные числа задачи (8), (9) состоят из чисел $\lambda_k = 2\pi k$ ($k = 0, 1, 2, \dots$), причем при $k \geq 1$ каждому собственному значению λ_k соответствуют две линейно независимые собственные функции $\cos \lambda_k x$, $\sin \lambda_k x$; кроме того, система

$$1, \cos \lambda_1 x, \sin \lambda_1 x, \dots, \cos \lambda_k x, \sin \lambda_k x, \dots$$

образует в $L_2(0, 1)$ ортогональный базис.

Классическое решение задачи (1)-(3), (5) будем искать в виде

$$u(x, t) = \sum_{k=0}^{\infty} u_{1k}(t) \cos \lambda_k x + \sum_{k=1}^{\infty} u_{2k}(t) \sin \lambda_k x, \quad (12)$$

где

$$u_{10}(t) = \int_0^1 u(x, t) dx, \quad u_{1k}(t) = 2 \int_0^1 u(x, t) \cos \lambda_k x dx \quad (k = 1, 2, \dots),$$

$$u_{2k}(t) = 2 \int_0^1 u(x, t) \sin \lambda_k x dx \quad (k = 1, 2, \dots).$$

Применяя формальный метод Фурье, из (1), (2) получаем:

$$(1 + \alpha \lambda_k^2) u_{1k}''(t) + \lambda_k^2 u_{1k}(t) = f_{1k}(t) \quad (k = 0, 1, 2, \dots, 0 \leq t \leq T), \quad (13)$$

$$u_{1k}(0) + \delta u_{1k}(T) = \varphi_{1k}, \quad (k = 0, 1, 2, \dots), \quad (14)$$

$$u_{1k}'(0) + \delta u_{1k}'(T) = \psi_{1k} \quad (k = 0, 1, 2, \dots),$$

$$(1 + \alpha \lambda_k^2) u_{2k}''(t) + \lambda_k^2 u_{2k}(t) = f_{2k}(t) \quad (k = 1, 2, \dots; 0 \leq t \leq T), \quad (15)$$

$$u_{2k}(0) + \delta u_{2k}(T) = \varphi_{2k} \quad (k = 1, 2, \dots), \quad (16)$$

$$u_{2k}'(0) + \delta u_{2k}'(T) = \psi_{2k} \quad (k = 1, 2, \dots),$$

где

$$\varphi_{10} = \int_0^1 \varphi(x) dx, \quad \psi_{10} = \int_0^1 \psi(x) dx, \quad f_{10}(t) = \int_0^1 f(x, t) dx,$$

$$\varphi_{1k} = 2 \int_0^1 \varphi(x) \cos \lambda_k x dx, \quad \psi_{1k} = 2 \int_0^1 \psi(x) \cos \lambda_k x dx, \quad (k = 1, \dots)$$

$$f_{1k}(t) = 2 \int_0^1 f(x, t) \cos \lambda_k x dx \quad (k = 1, 2, \dots),$$

$$\varphi_{2k} = 2 \int_0^1 \varphi(x) \sin \lambda_k x dx, \quad \psi_{2k} = 2 \int_0^1 \psi(x) \sin \lambda_k x dx \quad (k = 1, 2, \dots),$$

$$f_{2k}(t) = 2 \int_0^1 f(x, t) \sin \lambda_k x dx \quad (k = 1, 2, \dots).$$

Из (13)-(16) имеем:

$$u_{10}(t) = (1+\delta)^{-1}\varphi_{10} + (1+\delta)^{-1}(t - (1+\delta)^{-1}\delta T)\psi_{10} - \delta(1+\delta)^{-1} \int_0^T (T(1+\delta)^{-1} + t - \tau)f_{10}(\tau)d\tau + \int_0^t (t - \tau)f_{10}(\tau)d\tau \quad (0 \leq t \leq T), \quad (17)$$

$$u_{ik}(t) = \frac{1}{\rho_k(T)} \left\{ (\cos \beta_k t + \delta \cos \beta_k(T-t))\varphi_{ik} + \frac{1}{\beta_k}(\sin \beta_k t - \delta \sin \beta_k(T-t))\psi_{ik} - \frac{\delta}{\beta_k(1 + \alpha\lambda_k^2)} \int_0^T f_{ik}(\tau)(\sin \beta_k(T+t-\tau) + \delta \sin \beta_k(t-\tau))d\tau \right\} + \frac{1}{\beta_k(1 + \alpha\lambda_k^2)} \int_0^t f_{ik}(\tau) \sin \beta_k(t-\tau)d\tau \quad i = 1, 2, \quad (k = 1, 2, \dots, 0 \leq t \leq T), \quad (18)$$

где

$$\beta_k = \frac{\lambda_k^2}{\sqrt{1 + \alpha\lambda_k^2}}, \quad \rho_k(T) = 1 + 2\delta \cos \beta_k T + \delta^2 \quad (k = 1, 2, \dots).$$

Очевидно, что

$$u'_{ik}(t) = \frac{1}{\rho_k(T)} \left\{ \beta_k(-\sin \beta_k t + \delta \cos \beta_k(T-t))\varphi_{ik} + (\cos \beta_k t + \delta \cos \beta_k(T-t))\psi_{ik} - \frac{\delta}{1 + \alpha\lambda_k^2} \int_0^T f_{ik}(\tau)(\cos \beta_k(T+t-\tau) + \delta \cos \beta_k(t-\tau))d\tau \right\} + \frac{1}{1 + \alpha\lambda_k^2} \int_0^t f_{ik}(\tau) \cos \beta_k(t-\tau)d\tau \quad (i = 1, 2, \quad k = 1, 2, \dots, (0 \leq t \leq T)), \quad (19)$$

$$u''_{ik}(t) = \frac{1}{1 + \alpha\lambda_k^2} f_{ik}(t) - \frac{\beta_k^2}{\rho_k(T)} \left\{ (\cos \beta_k t + \delta \cos \beta_k(T-t))\psi_{ik} + \frac{1}{\beta_k}(\sin \beta_k t - \delta \sin \beta_k(T-t))\psi_{ik} - \frac{\delta}{\beta_k(1 + \alpha\lambda_k^2)} \int_0^T f_{ik}(\tau)(\sin \beta_k(T+t-\tau) + \delta \sin \beta_k(t-\tau))d\tau \right\} - \frac{\beta_k}{1 + \alpha\lambda_k^2} \int_0^t f_{ik}(\tau)(\sin \beta_k(t-\tau))d\tau \quad (i = 1, 2, \quad k = 1, 2, \dots; 0 \leq t \leq T), \quad (20)$$

$$u'_0(t) = (1 + \delta)^{-1}(\psi_{10} - \delta \int_0^T f_{10}(\tau)d\tau) + \int_0^t f_{10}(\tau)d\tau \quad (0 \leq t \leq T). \quad (21)$$

Теорема 1. Пусть $\delta \neq \mp 1$ и

1. $\varphi(x) \in C^4[0, 1]$, $\varphi^{(5)}(x) \in L_2(0, 1)$ и $\varphi(0) = \varphi(1)$, $\varphi'(0) = \varphi'(1)$, $\varphi''(0) = \varphi''(1)$, $\varphi'''(0) = \varphi'''(1)$, $\varphi^{(4)}(0) = \varphi^{(4)}(1)$.
2. $\psi(x) \in C^3[0, 1]$, $\psi^{(4)}(x) \in L_2(0, 1)$ и $\psi(0) = \psi(1)$, $\psi'(0) = \psi'(1)$, $\psi''(0) = \psi''(1)$, $\psi'''(0) = \psi'''(1)$.
3. $f(x, t), f_x(x, t) \in C(D_T)$, $f_{xx}(x, t) \in L_2(D_T)$ и $f(0, t) = f(1, t)$, $f_x(0, t) = f_x(1, t)$.

Тогда функция

$$\begin{aligned}
 u(x, t) = & (1 + \delta)^{-1} \left\{ \int_0^1 \varphi(x) dx + (t - \delta(1 + \delta)^{-1}T) \int_0^1 \psi(x) dx + \right. \\
 & \left. - \delta \int_0^T \int_0^1 (T(1 - \delta(1 + \delta)^{-1}) + t - \tau) f(x, t) dx d\tau \right\} + \int_0^t \int_0^1 (t - \tau) f(x, t) dx d\tau + \\
 & + \sum_{k=1}^{\infty} \left\{ \frac{1}{\rho_k(T)} \{ (\cos \beta_k t + \delta \cos \beta_k(T - t)) \varphi_{1k} + \frac{1}{\beta_k} (\sin \beta_k t - \delta \sin \beta_k(T - t)) \psi_{1k} - \right. \\
 & \quad \left. - \frac{\delta}{\beta_k(1 + \alpha \lambda_k^2)} \int_0^T f_{1k}(\tau) (\sin \beta_k(T + t - \tau) + \delta \sin \beta_k(t - \tau)) d\tau \right\} + \\
 & \quad \left. + \frac{1}{\beta_k(1 + \alpha \lambda_k^2)} \int_0^t f_{1k}(\tau) \sin \beta_k(t - \tau) d\tau \right\} \cos \lambda_k x + \\
 & + \sum_{k=1}^{\infty} \left\{ \frac{1}{\rho_k(T)} \{ (\cos \beta_k t + \delta \cos \beta_k(T - t)) \varphi_{2k} + \frac{1}{\beta_k} (\sin \beta_k t - \delta \sin \beta_k(T - t)) \psi_{2k} - \right. \\
 & \quad \left. - \frac{\delta}{\beta_k(1 + \alpha \lambda_k^2)} \int_0^T f_{2k}(\tau) (\sin \beta_k(T + t - \tau) + \delta \sin \beta_k(t - \tau)) d\tau \right\} + \\
 & \quad \left. + \frac{1}{\beta_k(1 + \lambda_k^2)} \int_0^t f_{2k}(\tau) \sin \beta_k(t - \tau) d\tau \right\} \sin \lambda_k x \tag{22}
 \end{aligned}$$

является решением задачи (1)-(3), (5).

До к а з а т е л ь с т в о. Нетрудно видеть, что

$$\frac{\lambda_k^2}{\sqrt{\alpha + 1}} < \beta_k < \frac{\lambda_k^2}{\sqrt{\alpha}}, \quad |\rho_k(T)| \geq 1 + \delta^2 - 2|\delta| \equiv \frac{1}{\rho}.$$

Учитывая это, из (18)-(20), соответственно, находим:

$$\begin{aligned}
 |u_{ik}(t)| & \leq \rho(1 + \delta) |\varphi_{ik}| + \frac{\sqrt{\alpha + 1}}{\lambda_k} \rho(1 + \delta) \psi_{ik} + \\
 & + \frac{\sqrt{\alpha + 1}}{\alpha} \frac{1}{\lambda_k^3} (1 + \rho\delta(1 + \delta)) \sqrt{T} \left(\int_0^T |f_{ik}(\tau)|^2 d\tau \right)^{\frac{1}{2}}, \quad (i = 1, 2) \\
 |u'_{ik}(t)| & \leq \rho(1 + \delta) \frac{\lambda_k^2}{\sqrt{\alpha}} |\varphi_{ik}| + \rho(1 + \delta) \psi_{ik} + \frac{1}{\alpha \lambda_k^2} (1 + \rho\delta(1 + \delta)) \sqrt{T} \left(\int_0^T |f_{ik}(\tau)|^2 d\tau \right)^{\frac{1}{2}}, \quad (i = 1, 2) \\
 |u''_{ik}(t)| & \leq \frac{1}{\alpha \lambda_k^2} |f_{ik}(t)| + \frac{\lambda_k^2}{\sqrt{\alpha}} \rho(1 + \delta) |\varphi_{ik}| + \sqrt{\frac{\alpha + 1}{\alpha}} \lambda_k |\psi_{ik}| + \\
 & + \frac{\sqrt{(\alpha + 1)T}}{\alpha^2 \lambda_k} (1 + \rho\delta(1 + \delta)) \left(\int_0^T |f_{ik}(\tau)|^2 d\tau \right)^{\frac{1}{2}} \quad (i = 1, 2) \\
 |u'''_{ik}(t)| & \leq \lambda_k^{-2} |f_{ik}(t)| + \rho(1 + |\delta|) (|\varphi_{ik}| + |\psi_{ik}|) + \\
 & + (1 + \rho|\delta|(1 + |\delta|)) \sqrt{T} \lambda_k^{-2} \left(\int_0^T |f_{ik}(\tau)|^2 d\tau \right)^{\frac{1}{2}} \quad (i = 1, 2).
 \end{aligned}$$

Отсюда имеем:

$$\begin{aligned}
 \left(\sum_{k=1}^{\infty} (\lambda_k^5 \|u_{ik}(t)\|_{C[0, T]})^2 \right)^{\frac{1}{2}} & \leq \sqrt{3} \rho(1 + \rho) \left(\sum_{k=1}^{\infty} (\lambda_k^5 |\varphi_{ik}|)^2 \right)^{\frac{1}{2}} + \sqrt{3(\alpha + 1)} \rho(1 + \rho) \left(\sum_{k=1}^{\infty} (\lambda_k^4 |\psi_{ik}|)^2 \right)^{\frac{1}{2}} + \\
 & + \frac{\sqrt{\alpha + 1}}{\alpha} (1 + \rho\delta(1 + \delta)) \sqrt{T} \left(\int_0^T \sum_{k=1}^{\infty} (\lambda_k^2 |f_{ik}(\tau)|)^2 d\tau \right)^{\frac{1}{2}} \quad (i = 1, 2),
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \left(\sum_{k=1}^{\infty} (\lambda_k \|u'_{ik}(t)\|_{C[0,T]})^2 \right)^{\frac{1}{2}} &\leq \sqrt{3}\rho \frac{1}{\sqrt{\alpha}}(1+\delta) \left(\sum_{k=1}^{\infty} (\lambda_k^2 |\varphi_{ik}|)^2 \right)^{\frac{1}{2}} + \sqrt{3}\rho(1+\rho) \left(\sum_{k=1}^{\infty} (\lambda_k |\psi_{ik}|)^2 \right)^{\frac{1}{2}} + \\ &+ \frac{1}{\alpha}(1+\rho\delta(1+\delta))\sqrt{T} \left(\int_0^T \sum_{k=1}^{\infty} |f_{ik}(\tau)|^2 d\tau \right)^{\frac{1}{2}} \quad (i = 1, 2), \\ \left(\sum_{k=1}^{\infty} (\lambda_{ik}^3 \|u''_k(t)\|_{C[0,T]})^2 \right)^{\frac{1}{2}} &\leq \frac{2}{\alpha} \left(\sum_{k=1}^{\infty} (\lambda_k |f_{ik}(\tau)|)^2 \right)^{\frac{1}{2}} + \frac{2}{\alpha}\rho(1+\rho) \left(\sum_{k=1}^{\infty} (\lambda_k^5 |\varphi_{ik}|)^2 \right)^{\frac{1}{2}} + \\ &+ \frac{\sqrt{\alpha+1}}{\sqrt{\alpha}}\rho(1+\rho) \left(\sum_{k=1}^{\infty} (\lambda_k^4 |\psi_{ik}|)^2 \right)^{\frac{1}{2}} + \\ &+ \frac{2\sqrt{\alpha+1}}{\alpha^2}(1+\rho\delta(1+\delta))\sqrt{T} \left(\int_0^T \sum_{k=1}^{\infty} \lambda_k^2 |f_{ik}(\tau)|^2 d\tau \right)^{\frac{1}{2}} \quad (i = 1, 2). \end{aligned}$$

или

$$\begin{aligned} \left(\sum_{k=1}^{\infty} (\lambda_k^5 \|u_{ik}(t)\|_{C[0,T]})^2 \right)^{\frac{1}{2}} &\leq \sqrt{3}\rho(1+\rho) \|\varphi^{(5)}(x)\|_{L_2(0,1)} + \sqrt{3(\alpha+1)}\rho(1+\rho) \|\psi^{(4)}(x)\|_{L_2(0,1)} + \\ &+ \frac{\sqrt{\alpha+1}}{\alpha}(1+\rho\delta(1+\delta))\sqrt{T} \|f_{xx}(x,t)\|_{L_2(D_T)} \quad (i = 1, 2), \end{aligned} \quad (23)$$

$$\begin{aligned} \left(\sum_{k=1}^{\infty} (\lambda_k \|u'_{ik}(t)\|_{C[0,T]})^2 \right)^{\frac{1}{2}} &\leq \sqrt{3}\rho \frac{1}{\sqrt{\alpha}}(1+\delta) \|\varphi''(x)\|_{L_2(0,1)} + \sqrt{3}\rho(1+\rho) \|\psi'(x)\|_{L_2(0,1)} + \\ &+ \frac{1}{\alpha}(1+\rho\delta(1+\delta))\sqrt{T} \|f(x,t)\|_{L_2(D_T)} \quad i = 1, 2), \end{aligned} \quad (24)$$

$$\begin{aligned} \left(\sum_{k=1}^{\infty} (\lambda_{ik}^3 \|u''_k(t)\|_{C[0,T]})^2 \right)^{\frac{1}{2}} &\leq \frac{2}{\alpha} \|f_x(x,t)\|_{L_2(D_T)} + \\ &+ \frac{2}{\alpha}\rho(1+\rho) \|\varphi^{(5)}(x)\|_{L_2(0,1)} + \frac{\sqrt{\alpha+1}}{\sqrt{\alpha}}\rho(1+\rho) \|\psi^{(4)}(x)\|_{L_2(0,1)} + \\ &+ \frac{2\sqrt{\alpha+1}}{\alpha^2}(1+\rho\delta(1+\delta))\sqrt{T} \|f_{xx}(x,t)\|_{L_2(D_T)} \quad (i = 1, 2). \end{aligned} \quad (25)$$

Далее, из (12) и (16), соответственно, получаем:

$$\begin{aligned} |u_{10}(t)| &\leq |1+\delta|^{-1} (\|\varphi(x)\|_{L_2(0,1)} + T(1+|\delta| |1+\delta|^{-1} |\delta|) \|\psi(x)\|_{L_2(0,1)}) + \\ &+ T\sqrt{T}(2+|\delta|(3+|\delta| |1+\delta|^{-1})) \|f(x,t)\|_{L_2(D_T)}, \end{aligned} \quad (26)$$

$$\|u'_0(t)\| \leq |1+\delta|^{-1} \|\psi(x)\|_{L_2(0,1)} + \sqrt{T}(1+|\delta| |1+\delta|^{-1}) \|f(x,t)\|_{L_2(D_T)}. \quad (27)$$

Очевидно, что

$$|u(x,t)| \leq \|u_0(t)\|_{C[0,T]} + \left(\sum_{k=1}^{\infty} \lambda_k^{-6} \right)^{1/2} \sum_{i=1}^2 \left(\sum_{k=1}^{\infty} (\lambda_k^3 \|u_{ik}(t)\|_{C[0,T]})^2 \right)^{1/2}, \quad (28)$$

$$|u_t(x,t)| \leq \|u'_0(t)\|_{C[0,T]} + \left(\sum_{k=1}^{\infty} \lambda_k^{-6} \right)^{1/2} \sum_{i=1}^2 \left(\sum_{k=1}^{\infty} (\lambda_k \|u'_{ik}(t)\|_{C[0,T]})^2 \right)^{1/2}, \quad (29)$$

$$|u_{tt}(x, t)| \leq \|u_0''(t)\|_{C[0, T]_+} \left(\sum_{k=1}^{\infty} \lambda_k^{-6} \right)^{1/2} \sum_{i=1}^2 \left(\sum_{k=1}^{\infty} (\lambda_k^3 \|u_{ik}''(t)\|_{C[0, T]})^2 \right)^{1/2}, \quad (30)$$

$$|u_{xxxx}(x, t)| \leq \left(\sum_{k=1}^{\infty} \lambda_k^{-2} \right)^{1/2} \sum_{i=1}^2 \left(\sum_{k=1}^{\infty} (\lambda_k^5 \|u_{ik}(t)\|_{C[0, T]})^2 \right)^{1/2}, \quad (31)$$

$$|u_{ttxx}(x, t)| \leq \left(\sum_{k=1}^{\infty} \lambda_k^{-2} \right)^{1/2} \sum_{i=1}^2 \left(\sum_{k=1}^{\infty} (\lambda_k^3 \|u_k''(t)\|_{C[0, T]})^2 \right)^{1/2}. \quad (32)$$

Из (28)-(32) с учетом (24)-(27) следует, что функции $u(x, t)$, $u_t(x, t)$, $u_{tt}(x, t)$, $u_{xxxx}(x, t)$, $u_{ttxx}(x, t)$ непрерывны в D_T . Непосредственной проверкой убеждаемся, что функция $u(x, t)$ удовлетворяет уравнению (1) и условиям (2), (3) в обычном смысле.

Доказательство завершено.

С помощью Леммы 1 доказывается следующая

Теорема 2. Пусть выполняются все условия Теоремы 1 и

$$\int_0^1 \varphi(x) dx = 0, \quad \int_0^1 \psi(x) dx = 0, \quad \int_0^1 f(x, t) dx = 0 \quad (0 \leq t \leq T).$$

Тогда функция

$$\begin{aligned} u(x, t) = & -\frac{\delta}{1+\delta} \int_0^T \int_0^1 (T(1-\delta(1+\delta)^{-1}) + t - \tau) f(x, t) dx dt + \int_0^t \int_0^1 (t - \tau) f(x, t) dx d\tau + \\ & + \sum_{k=1}^{\infty} \left\{ \frac{1}{\rho_k(T)} \{ (\cos \beta_k t + \delta \cos \beta_k(T-t)) \varphi_{1k} + \frac{1}{\beta_k} (\sin \beta_k t - \delta \sin \beta_k(T-t)) \psi_{1k} - \right. \\ & - \frac{\delta}{\beta_k(1+\alpha\lambda_k^2)} \int_0^T f_{1k}(\tau) (\sin \beta_k(T+t-\tau) + \delta \sin \beta_k(t-\tau)) d\tau \} + \\ & \left. + \frac{1}{\beta_k(1+\alpha\lambda_k^2)} \int_0^t f_{1k}(\tau) \sin \beta_k(t-\tau) d\tau \right\} \cos \lambda_k x + \\ & + \sum_{k=1}^{\infty} \left\{ \frac{1}{\rho_k(T)} \{ (\cos \beta_k t + \delta \cos \beta_k(T-t)) \varphi_{2k} + \frac{1}{\beta_k} (\sin \beta_k t - \delta \sin \beta_k(T-t)) \psi_{2k} - \right. \\ & - \frac{\delta}{\beta_k(1+\alpha\lambda_k^2)} \int_0^T f_{2k}(\tau) (\sin \beta_k(T+t-\tau) + \delta \sin \beta_k(t-\tau)) d\tau \} + \\ & \left. + \frac{1}{\beta_k(1+\lambda_k^2)} \int_0^t f_{2k}(\tau) \sin \beta_k(t-\tau) d\tau \right\} \sin \lambda_k x \end{aligned}$$

является классическим решением задачи (1)-(5).

Докажем единственность решения (1)-(3), (5).

Имеет место теорема.

Теорема 3. Если $\delta \neq \pm 1$, то задача (1)-(3), (5) не может иметь более одного решения.

Доказательство. Допустим, что существуют два решения рассматриваемой задачи:

$$u_1(x, t), u_2(x, t)$$

и рассмотрим разность $v(x, t) = u_1(x, t) - u_2(x, t)$.

Очевидно, что функция $v(x, t)$ удовлетворяет однородному уравнению

$$v_{tt}(x, t) - \alpha v_{ttxx}(x, t) + v_{xxxx}(x, t) = 0 \quad (33)$$

и условиям:

$$v(0, t) = v(1, t), \quad v_x(0, t) = v_x(1, t), \quad v_{xx}(0, t) = v_{xx}(1, t), \quad v_{xxx}(0, t) = v_{xxx}(1, t) \quad (0 \leq t \leq T), \quad (34)$$

$$v(x, 0) + \delta v(x, T) = 0, v_t(x, 0) + \delta v_t(x, T) = 0 \quad (0 \leq x \leq 1). \quad (35)$$

Докажем, что функция $v(x, t)$ тождественно равна нулю.

Умножим обе части уравнения (33) на функцию $2v_t(x, t)$ и проинтегрируем полученное равенство по x от 0 до 1 :

$$2 \int_0^1 v_{tt}(x, t)v_t(x, t)dx - 2\alpha \int_0^1 v_{ttxx}(x, t)v_t(x, t)dx + 2 \int_0^1 v_{xxxx}(x, t)v_t(x, t)dx = 0. \quad (36)$$

Пользуясь граничными условиями (34), имеем:

$$2 \int_0^1 v_{tt}(x, t)v_t(x, t)dx = \frac{d}{dt} \int_0^1 v_t^2(x, t)dx;$$

$$2 \int_0^1 v_{ttxx}(x, t)v_t(x, t)dx = 2(v_{ttx}(1, t)v_t(1, t) - v_{ttx}(0, t)v_t(0, t)) - \\ - 2 \int_0^1 v_{ttx}(x, t)v_{tx}(x, t)dx = -\frac{d}{dt} \int_0^1 v_{tx}^2(x, t)dx;$$

$$2 \int_0^1 v_{xxxx}(x, t)v_t(x, t)dx = 2(v_{xxx}(1, t)v_t(1, t) - v_{xxx}(0, t)v_t(0, t)) - \\ - 2 \int_0^1 v_{xxx}(x, t)v_{tx}(x, t)dx = -2 \int_0^1 v_{xxx}(x, t)v_{tx}(x, t)dx = \\ = -2(v_{xx}(1, t)v_{tx}(1, t) - v_{xx}(0, t)v_{tx}(0, t)) + 2 \int_0^1 v_{xx}(x, t)v_{txx}(x, t)dx = \frac{d}{dt} \int_0^1 v_{xx}^2(x, t)dx.$$

Тогда из (36) имеем:

$$\frac{d}{dt} \int_0^1 v_t^2(x, t)dx + \frac{d}{dt} \int_0^1 v_{tx}^2(x, t)dx + \frac{d}{dt} \int_0^1 v_{xx}^2(x, t)dx = 0,$$

или

$$y(t) \equiv \int_0^1 v_t^2(x, t)dx + \int_0^1 v_{tx}^2(x, t)dx + \int_0^1 v_{xx}^2(x, t)dx = C.$$

Отсюда, с учетом (35), получаем:

$$y(0) - \delta^2 y(T) = \int_0^1 (v_t^2(x, 0) - \delta^2 v_t^2(x, T))dx + \\ + \int_0^1 (v_{tx}^2(x, 0) - \delta^2 v_{tx}^2(x, T))dx + \int_0^1 (v_{xx}^2(x, 0) - \delta^2 v_{xx}^2(x, T))dx = 0.$$

Таким образом,

$$y(0) - \delta^2 y(T) = C(1 - \delta^2) = 0.$$

Так как $\delta \neq \pm 1$, то $C = 0$. Следовательно,

$$\int_0^1 v_t^2(x, t)dx + \int_0^1 v_{tx}^2(x, t)dx + \int_0^1 v_{xx}^2(x, t)dx \equiv 0.$$

Отсюда заключаем, что

$$v_t(x, t) \equiv 0, v_{tx}(x, t) \equiv 0, v_{xx}(x, t) \equiv 0,$$

Откуда, с учетом (34), и следует тождество

$$v(x, t) = const = C_0.$$

Пользуясь нелокальным условием (6), имеем:

$$v(x, 0) + \delta v(x, T) = C_0(1 + \delta) = 0.$$

Следовательно, $C_0 = 0$, ибо $\delta \neq -1$.

Тем самым доказано, что

$$v(x, t) = 0.$$

Таким образом, если существуют два решения $u_1(x, t)$ и $u_2(x, t)$ задачи (1)-(3),(5), то $u_1(x, t) \equiv u_2(x, t)$. Отсюда следует, что если решение задачи (1)-(3),(5) существует, то оно единственное.

Д о к а з а т е л ь с т в о з а в е р ш е н о .

С помощью Леммы 1 из последней теоремы немедленно вытекает единственность исходной задачи (1)-(5).

Теорема 4. Пусть выполняются условия Теоремы 3 и

$$\varphi(x) \in C[0, 1], \int_0^1 \varphi(x) dx = 0, \psi(x) \in C[0, 1], \int_0^1 \psi(x) dx = 0,$$

$$f(x, t) \in C(D_T), \int_0^1 f(x, t) dx = 0 \quad (0 \leq t \leq T).$$

Тогда задача (1)-(5) не может иметь более одного классического решения.

Литература

1. Самарский А. А. О некоторых проблемах теории дифференциальных уравнений // Диф. уравнения. 1980. Т. 16, № 11. С. 1925–1935.
2. Cannon J. R. The solution of the heat equation subject to the specification of energy // Quart. Appl. Math.. 1963. Vol. 5, № 21. pp. 155–160.
3. Ионкин, Н. И. Решение одной краевой задачи теории теплопроводности с неклассическим краевым условием // Диф. уравнения. 1977. Т. 13, № 2. С. 294–304.
4. Нахушев А. М. Об одном приближенном методе решения краевых задач для дифференциальных уравнений и его приближения к динамике померенной влаги и грунтовых вод // Диф. уравнения. 1982. Т. 18, № 1. С. 72–81.
5. Смирнов В. И. Курс высшей математики. М.: ФИЗМАТЛИТ. 1957. Т. 5. 657 с.
6. Будак Б. М., Самарский А. А., Тихонов А. Н. Сборник задач по математической физике. М.: ФИЗМАТЛИТ. 1972. 686 с.
7. Мегралиев Я. Т. О разрешимости одной обратной краевой задачи для псевдогиперболического уравнения четвертого порядка с дополнительным интегральным условием // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. 2013. № 1 (25). С. 19-33.
8. Мегралиев Я. Т. Обратная краевая задача для дифференциального уравнения с частными производными четвертого порядка с интегральным условием // Вестн. Южно-Ур. ун-та. Сер. Матем. Мех. Физ. 2011. № 5. С. 51–56.

MSC2020 35G16, 35A01, 35A02, 35A09

On a Boundary Value Problem for the fourth-order partial differential equation with the non-local conditions

M. B. Mursalova, T. M. Kasimov
Baku State University

Abstract: One boundary-value problem is investigated for a fourth-order partial differential equation with an integral boundary condition. First, an original problem is reduced to the equivalent problem, the theorem on existence and uniqueness of solution is proved for the latter. Then, using these facts authors prove existence and uniqueness of the classical solution of the original problem.

Keywords: boundary value problem, differential equations, existence of solution, uniqueness of solution, classical solution.

References

1. A. A. Samarsky. ["On some problems of the theory of differential equations"]. Diff. Eq. 1980. Vol. 16, No. 11. pp. 1925-1935. (In Russ.)
2. J. R. Cannon. The solution of the heat equation subject to the specification of energy. Quart. Appl. Math. 1963. Vol. 5, No. 21. pp. 155–160.
3. N. J. Ionkin. ["Solution of one Boundary Value problem of the Heat Transmission Theory with the non-classic boundary condition"]. Dif. Eq. 1977. Vol. 13, No. 2. pp. 294-304. (In Russ.)
4. A. M. Nakhushhev. ["On one approximate method of solution of the Boundary Value problems for differential equations and its approximation for measured moisture dynamics and groundwater"]. Dif. Eq. 1982. Vol. 18, No. 1. pp. 72-81. (In Russ.)
5. V. J. Smirnov. Kurs vysshey matematiki ["Higher Mathematics Course"]. Moscow, FIZMATLIT. 1972. 686 p. (In Russ.)
6. B. M. Budak, A. A. Samarsky, A. N. Tikhonov. Sbornik zadach po matematicheskoy fizike. ["Problems for the Mathematical Physics equations"]. Moscow, FIZMATLIT. 1972. 686 p. (In Russ.)
7. Y. T. Meqraliyev. ["On the solvability of an inverse boundary value problem for a pseudo-hyperboic equation of the 4-th order with the additional integral condition"]. University proceedings. Volga region. Physical and mathematical sciences". 2013. No. 1 (25). pp. 19-33. (In Russ.)
8. Y. T. Meqraliyev. ["Inverse boundary value problem for the partial differential equation of the 4-th order with integral condition"]. Vestn. Yuzhno-Ural. Gos. Un-ta. Ser. Matem. Mekh. Fiz. 2011. No. 5. pp. 51–56 (In Russ.)

УДК 51-76

Динамическое поведение для группы биологических нейронов ФитцХью-Нагумо

Федоров Е. Г., Попов И. Ю.

Университет ИТМО

Аннотация: В настоящей работе рассмотрено связанное и ориентированное кольцо нейронов. Для такой конфигурации изучается зависимость динамики системы от задержки при передаче импульса между нейронами и от количества нейронов в кольце. Для описания нейрона используется модель ФитцХью-Нагумо как модель, способная описать основные особенности биологического нейрона и при этом достаточная простая вычислительно. Полученные результаты проверены численно. В заключении показано, что прямолинейной зависимости периода прохождения импульса по кольцу от количества нейронов в кольце нет. Также получены критерии для определения локальных бифуркаций.

Ключевые слова: система ФитцХью-Нагумо, задержка связи, нейронные сети, устойчивость, бифуркации Хопфа.

1. Введение

Временная задержка может сильно повлиять на сеть нейронов и существенно расширить область возможных поведений сети. По этой причине активно исследуются модели сетей, где связь между нейронами происходит с запаздыванием. Работы, посвященные сети связанных нейронов с идентичной задержкой, приведены в [1, 2]. Работы по различному времени запаздывания при передаче освещены в [3–6]. Чаще всего в таких исследованиях рассматривается пара связанных нейронов.

В данной работе изучено влияние задержки при передаче импульса между связанными нейронами на динамику системы нейронов в целом. Для описания одного нейрона использована модель ФитцХью-Нагумо. Система в целом представляет собой ориентированное кольцо из связанных друг за другом нейронов. При этом любая связь между нейронами будет рассматриваться с постоянной задержкой. Основной целью является определение типа поведения в зависимости от времени задержки, а также проверка гипотезы об отсутствии прямой зависимости между количеством нейронов и периодом собственных колебаний импульса в системе. Для этого в первой части работы проведен анализ состояний равновесия и их устойчивости. Во второй части работы полученные результаты проверены численно.

2. Сеть нейронов

Будем рассматривать группу нейронов, где у каждого нейрона могут быть однонаправленные связи с другими нейронами. Аксон нейрона можно назвать его выходом, а для другого нейрона он будет входом (через связку синапсов и дендритов). Для описания одного нейрона будем использовать модель ФитцХью-Нагумо [7, 8]:

$$\begin{cases} \dot{u} = -au + (a + 1)u^2 - u^3 - v + I \\ \dot{v} = bu - \gamma v \end{cases} \quad (1)$$

где $u(t)$ соответствует потенциалу нейрона в момент времени t ; $v(t)$ – функция внутреннего состояния в момент времени t ; a, b, γ – положительные постоянные параметры нейрона; I – внешний ток к нейрону.

В качестве внешнего тока I для нейрона будем рассматривать суммарное воздействие других нейронов, а выходом будет значение потенциала нейрона с задержкой τ (задержка на передачу импульса через аксон). При этом воздействие между нейронами будет сигмоидальным (то есть не зависит от постсинаптического нейрона). Таким образом модель i -ого нейрона будет следующей:

$$\begin{cases} \dot{u}_i = -au_i + (a+1)u_i^2 - u_i^3 - v_i + \sum_{j=1, j \neq i}^n c \tanh(u_j^\tau) \\ \dot{v}_i = bu_i - \gamma v_i \end{cases} \quad (2)$$

2.1. Кольцо из связанных нейронов

В этом разделе рассмотрим конкретную сеть нейронов в виде ориентированного кольца. Входом нейрона i будет выход нейрона $i-1$ ($i \geq 2$), а входом нейрона 1 будет выход нейрона n . При этом все нейроны являются идентичными по своим параметрам. Схематическое изображение рассматриваемой сети приведено на рис. 1.

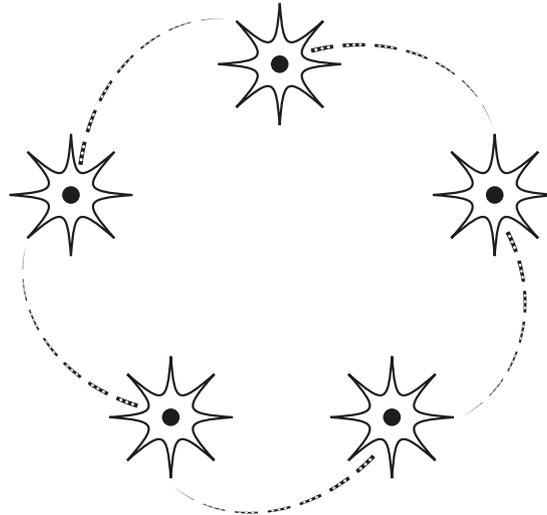


Рис. 1. Схематическое изображение ориентированного кольца связанных нейронов

Запишем модель рассматриваемой сети нейронов:

$$\begin{cases} \dot{u}_1 = -au_1 + (a+1)u_1^2 - u_1^3 - v_1 + c \tanh(u_n^\tau) \\ \dot{v}_1 = bu_1 - \gamma v_1 \\ \dot{u}_2 = -au_2 + (a+1)u_2^2 - u_2^3 - v_2 + c \tanh(u_1^\tau) \\ \dot{v}_2 = bu_2 - \gamma v_2 \\ \dots \\ \dot{u}_n = -au_n + (a+1)u_n^2 - u_n^3 - v_n + c \tanh(u_{n-1}^\tau) \\ \dot{v}_n = bu_n - \gamma v_n \end{cases} \quad (3)$$

где $u_i(t)$ соответствует потенциалу i -ого нейрона в момент времени t , а $v_i(t)$ – функция внутреннего состояния в момент времени t , a, b, γ – положительные постоянные параметры нейронов, c – положительная постоянная, сила связи, $u_i^\tau(t) = u_i(t - \tau)$, $i = 1, 2, \dots, n$.

2.1.1. Найдем состояния равновесия

Для поиска состояний равновесия системы необходимо решить:

$$\begin{cases} 0 = -au_1 + (a+1)u_1^2 - u_1^3 - v_1 + c \tanh(u_2) \\ 0 = bu_1 - \gamma v_1 \\ 0 = -au_2 + (a+1)u_2^2 - u_2^3 - v_2 + c \tanh(u_1) \\ 0 = bu_2 - \gamma v_2 \\ \dots \\ 0 = -au_n + (a+1)u_n^2 - u_n^3 - v_n + c \tanh(u_{n-1}) \\ 0 = bu_n - \gamma v_n \end{cases} \quad (4)$$

$$\begin{cases} v_i = \frac{b}{\gamma} u_i, \quad i \in [1 \dots n] \\ c \tanh(u_{i-1}) = u_i^3 - (a+1)u_i^2 + \left(a + \frac{b}{\gamma}\right) u_i, \quad i \in [2 \dots n] \\ c \tanh(u_n) = u_1^3 - (a+1)u_1^2 + \left(a + \frac{b}{\gamma}\right) u_1 \end{cases} \quad (5)$$

Часть уравнений в системе можно представить в виде:

$$\begin{cases} f(u_{i-1}) = g(u_i) \\ f(u_n) = g(u_1) \end{cases} \quad (6)$$

где $f(u) = c \tanh(u)$, $g(u) = u^3 - (a+1)u^2 + \left(a + \frac{b}{\gamma}\right) u$.

Пусть $\frac{b}{\gamma} \geq \frac{1}{3}(a^2 - a + 1)$. Такое предположение подходит под основные рассматриваемые параметры нейронов [2,9], где $a < 1$, а b приблизительно равно γ . Далее в этой секции везде будем считать, что предположение выполнено.

Предположение 1. В описанной системе состояния равновесия у нейронов совпадают, то есть $u_i = u_j, v_i = v_j, \forall i, j$.

Доказательство. Для доказательства покажем, что функция $g(x)$ будет возрастающей. Производная $g(x)$: $g'(u) = 3u^2 - 2(a+1)u + a + \frac{b}{\gamma}$. Тогда, если $\frac{b}{\gamma} \geq \frac{1}{3}(a^2 - a + 1)$, то $(a+1)^2 - 3\left(a + \frac{b}{\gamma}\right) \leq 0$, что совпадает с детерминантом $g(u)/2$. Значит, $g(u)$ – возрастающая функция (старший коэффициент положителен). Теперь для системы (6) функции $f(u)$ и $g(u)$ являются возрастающими, а значит, предположение, что какие-то два связанных нейрона имеют отличные значения потенциала состояния равновесия, приводит к противоречию. Таким образом, $u_i = u_j, \forall i, j$, следовательно и $v_i = v_j, \forall i, j$.

Доказательство завершено.

Теперь систему (5) можно привести к равносильной:

$$\begin{cases} v_i = \frac{b}{\gamma} u_i, \quad i \in [1 \dots n] \\ u_i = u_1, \quad i \in [2 \dots n] \\ c \tanh(u_1) = u_1^3 - (a+1)u_1^2 + \left(a + \frac{b}{\gamma}\right) u_1 \end{cases} \quad (7)$$

Поиск состояний равновесия свелся к поиску корней уравнения $c \tanh(u_1) = u_1^3 - (a+1)u_1^2 + \left(a + \frac{b}{\gamma}\right) u_1$. Заметим, что $u_1 = 0$ всегда является корнем. У правой части уравнения

есть всего одна точка перегиба и она расположена в правой полуоси координат. Теперь выделим несколько случаев:

1) $a + \frac{b}{\gamma} > c$, тогда у рассматриваемого уравнения нет отрицательных решений, а положительных может быть 0, 1 или 2 (с ростом c количество корней растет от 0 до 2, 1 корень при единственном критическом значении c).

2) $a + \frac{b}{\gamma} < c$, тогда у рассматриваемого уравнения есть только одно отрицательное и одно положительное решение.

2.1.2. Определим устойчивость состояний равновесия

Для определения устойчивости состояний равновесия рассматриваемой системы нейронов, линеаризуем систему в общем состоянии равновесия $u_i = u_1, v_i = v_1, i \in [2 \dots n]$. Для этого перепишем систему (3) в виде $\dot{U}(t) = AU(t) + BU(t - \tau)$, где $U(t) = (u_1(t), v_1(t), \dots, u_n(t), v_n(t))^T$:

$$A = \begin{pmatrix} -\alpha & -1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ b & -\gamma & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\alpha & -1 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & b & -\gamma & \dots & 0 & 0 \\ & & & \dots & & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & -\alpha & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & b & -\gamma \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & c' & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ c' & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & & & \dots & & & \\ 0 & 0 & \dots & c' & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (8)$$

где $\alpha = 3u_1^2 - 2u_1(a + 1) + a$, $c' = \frac{c}{\text{ch}^2(u_1)}$.

Далее найдем решения характеристического уравнения $\det(A - \lambda I + Be^{-\lambda\tau}) = 0$ для определения устойчивости:

$$\begin{vmatrix} -\alpha - \lambda & -1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & c'e^{-\lambda\tau} & 0 \\ b & -\gamma - \lambda & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ c'e^{-\lambda\tau} & 0 & -\alpha - \lambda & -1 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & b & -\gamma - \lambda & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & & & \dots & & & & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & c'e^{-\lambda\tau} & 0 & -\alpha - \lambda & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & b & -\gamma - \lambda \end{vmatrix} = 0. \quad (9)$$

Чтобы найти определитель распишем его по верхней строке. Первые два элемента сведут задачу к аналогичной с меньшей размерностью и эта часть определителя равна $((-\alpha - \lambda)(-\gamma - \lambda) + b)^n$. Третий элемент в верхней строке однозначно задает набор элементов в матрице и часть соответствующая ему равна $-(c'e^{-\lambda\tau}(-\gamma - \lambda))^n$. В итоге:

$$((-\alpha - \lambda)(-\gamma - \lambda) + b)^n - \left(c'e^{-\lambda\tau}(-\gamma - \lambda)\right)^n = 0, \quad (10)$$

$$(\alpha + \lambda)(\gamma + \lambda) + b = c'e^{-\lambda\tau + \frac{2\pi k}{n}i}(\gamma + \lambda), \quad k \in [0 \dots n - 1]. \quad (11)$$

Для определения устойчивости в системе при отсутствии задержки возьмем $\tau = 0$. Тогда:

$$\lambda^2 + \lambda(\alpha + \gamma - c'e^{\frac{2\pi k}{n}i}) + \alpha\gamma + b - c'\gamma e^{\frac{2\pi k}{n}i} = 0, \quad k \in [0 \dots n - 1]. \quad (12)$$

Для четного нечетного n эти уравнения можно разбить на пары $(k; -k)$ и останется одно уравнение для $k = 0$. Для четного n эти уравнения можно разбить на пары $(k; -k)$ и останется два уравнения для $k = 0$ и $k = \frac{n}{2}$. Далее определим устойчивость выделенных групп.

Для $k = 0$:

$$\lambda^2 + \lambda(\alpha + \gamma - c') + \alpha\gamma + b - c'\gamma = 0, \quad (13)$$

Эта пара корней будет устойчива тогда и только тогда, когда:

$$\begin{cases} \alpha + \gamma - c' > 0 \\ \alpha + \frac{b}{\gamma} - c' > 0 \end{cases}. \quad (14)$$

то есть $\alpha + \min\left(\gamma, \frac{b}{\gamma}\right) > c'$. А для нулевого состояния равновесия:

$$a + \min\left(\gamma, \frac{b}{\gamma}\right) > c. \quad (15)$$

Для $k = \frac{n}{2}$ ($n : 2$):

$$\lambda^2 + \lambda(\alpha + \gamma + c') + \alpha\gamma + b + c'\gamma = 0, \quad (16)$$

Эта пара корней будет устойчива тогда и только тогда, когда:

$$\begin{cases} \alpha + \gamma + c' > 0 \\ \alpha + \frac{b}{\gamma} + c' > 0 \end{cases}. \quad (17)$$

то есть $\alpha + \min\left(\gamma, \frac{b}{\gamma}\right) > -c'$. Для нулевого состояния равновесия это условие автоматически выполнено, так как $c > 0$.

Для пары $(k; -k)$ ($k \neq 0, k \neq \frac{n}{2}$):

$$\begin{aligned} & \left(\lambda^2 + \lambda(\alpha + \gamma - c'e^{-\frac{2\pi k}{n}i}) + \alpha\gamma + b - c'\gamma e^{-\frac{2\pi k}{n}i}\right) \cdot \\ & \left(\lambda^2 + \lambda(\alpha + \gamma - c'e^{\frac{2\pi k}{n}i}) + \alpha\gamma + b - c'\gamma e^{\frac{2\pi k}{n}i}\right) = 0, \end{aligned} \quad (18)$$

$$\begin{aligned} & (\lambda^2 + \lambda(\alpha + \gamma) + \alpha\gamma + b)^2 - 2(\lambda^2 + \lambda(\alpha + \gamma) + \alpha\gamma + b)c'(\gamma + \lambda)\cos\frac{2\pi k}{n} + \\ & c'^2(\gamma + \lambda)^2 = 0, \end{aligned} \quad (19)$$

$$\begin{aligned} \lambda^4 + 2(\alpha + \gamma - c' \cos \frac{2\pi k}{n}) \lambda^3 + ((\alpha + \gamma)^2 + 2(\alpha\gamma + b) - 2(\alpha + 2\gamma)c' \cos \frac{2\pi k}{n} + c'^2) \lambda^2 + \\ 2((\alpha + \gamma)(\alpha\gamma + b) - (\alpha + \gamma)c'\gamma \cos \frac{2\pi k}{n} - (\alpha\gamma + b)c' \cos \frac{2\pi k}{n} + c'^2\gamma) \lambda + \\ (\alpha\gamma + b)^2 - 2(\alpha\gamma + b)c'\gamma \cos \frac{2\pi k}{n} + c'^2\gamma^2 = 0, \end{aligned} \quad (20)$$

Получено уравнение 4-ой степени с вещественными коэффициентами, его устойчивость может быть проверена по критерию Гурвица или Михайлова.

Теперь найдем кандидатов в бифуркацию от устойчивого равновесия к неустойчивому или наоборот (когда есть чисто мнимое собственное значение). Для этого возьмем $\lambda = i\omega$:

$$(\alpha + i\omega)(\gamma + i\omega) + b = c' e^{-i\omega\tau + \frac{2\pi k}{n}i} (\gamma + i\omega), \quad (21)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \alpha\gamma - \omega^2 + b + i\omega(\alpha + \gamma) = c'(\gamma \cos \tau' + \omega \sin \tau' + i(\omega \cos \tau' - \gamma \sin \tau')) \\ \tau' = \omega\tau - \frac{2\pi k}{n} \end{array} \right. , \quad (22)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \alpha\gamma - \omega^2 + b = c'(\gamma \cos \tau' + \omega \sin \tau') \\ \omega(\alpha + \gamma) = c'(\omega \cos \tau' - \gamma \sin \tau') \\ \tau' = \omega\tau - \frac{2\pi k}{n} \end{array} \right. , \quad (23)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} c'(\omega^2 + \gamma^2) \cos \tau' = \alpha(\omega^2 + \gamma^2) + b\gamma \\ c'(\omega^2 + \gamma^2) \sin \tau' = -\omega(\omega^2 + \gamma^2) + b\omega \\ \tau' = \omega\tau - \frac{2\pi k}{n} \end{array} \right. , \quad (24)$$

пусть $\tau' \neq \frac{\pi}{2} + \pi k, k \in \mathbb{Z}$, тогда:

$$\left\{ \begin{array}{l} \operatorname{tg}(\omega\tau - \frac{2\pi k}{n}) = \frac{-\omega(\omega^2 + \gamma^2) + b\omega}{\alpha(\omega^2 + \gamma^2) + b\gamma} \\ \operatorname{sign}(\cos(\omega\tau - \frac{2\pi k}{n})) = \operatorname{sign}(\alpha(\omega^2 + \gamma^2) + b\gamma) \\ c'^2(\omega^2 + \gamma^2)^2 = (\alpha(\omega^2 + \gamma^2) + b\gamma)^2 + (-\omega(\omega^2 + \gamma^2) + b\omega)^2 \end{array} \right. , \quad (25)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \operatorname{tg}(\omega\tau - \frac{2\pi k}{n}) = \frac{-\omega(\omega^2 + \gamma^2) + b\omega}{\alpha(\omega^2 + \gamma^2) + b\gamma} \\ \operatorname{sign}(\cos(\omega\tau - \frac{2\pi k}{n})) = \operatorname{sign}(\alpha(\omega^2 + \gamma^2) + b\gamma) \\ c'^2(\omega^2 + \gamma^2) = \alpha^2(\omega^2 + \gamma^2) + 2b\alpha\gamma + b^2 + \omega^2(\omega^2 + \gamma^2) - 2b\omega^2 \end{array} \right. , \quad (26)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \operatorname{tg}(\omega\tau - \frac{2\pi k}{n}) = \frac{-\omega(\omega^2 + \gamma^2) + b\omega}{\alpha(\omega^2 + \gamma^2) + b\gamma} \\ \operatorname{sign}(\cos(\omega\tau - \frac{2\pi k}{n})) = \operatorname{sign}(\alpha(\omega^2 + \gamma^2) + b\gamma) \\ \omega^4 + (\alpha^2 + \gamma^2 - c'^2 - 2b)\omega^2 + \alpha^2\gamma^2 + 2b\alpha\gamma + b^2 - c'^2\gamma^2 = 0 \end{array} \right. . \quad (27)$$

Таким образом, у системы может быть 0, 1 или 2 серии решений.

При условии $\alpha(\omega^2 + \gamma^2) + b\gamma > 0$ (что всегда верно для нулевого состояния равновесия) получаем (если условие неверно, то серию для τ' необходимо сместить на π):

$$\begin{cases} \omega = \left(\frac{1}{2} \left(-(\alpha^2 + \gamma^2 - c'^2 - 2b) \pm \sqrt{(\alpha^2 - \gamma^2 - c'^2)^2 - 4b((\alpha + \gamma)^2 - c'^2)} \right) \right)^{\frac{1}{2}} \\ \tau = \frac{1}{\omega} \arctg \left(\frac{-\omega(\omega^2 + \gamma^2) + b\omega}{\alpha(\omega^2 + \gamma^2) + b\gamma} \right) + \frac{2\pi m}{\omega} + \frac{2\pi k}{n\omega}, \quad k, m \in \mathbb{Z} \end{cases} \quad (28)$$

$$\begin{cases} \omega = \left(\frac{1}{2} \left(-(\alpha^2 + \gamma^2 - c'^2 - 2b) \pm \sqrt{(\alpha^2 - \gamma^2 - c'^2)^2 - 4b((\alpha + \gamma)^2 - c'^2)} \right) \right)^{\frac{1}{2}} \\ \tau = \frac{1}{\omega} \arctg \left(\frac{-\omega(\omega^2 + \gamma^2) + b\omega}{\alpha(\omega^2 + \gamma^2) + b\gamma} \right) + \frac{2\pi k}{n\omega}, \quad k \in \mathbb{Z} \end{cases} \quad (29)$$

Далее определим условия наличия кандидатов в локальную бифуркацию, т. е. условия, при которых у (27) существует вещественный корень или положительный для ω^2 :

1. Если $c' > |\alpha + \frac{b}{\gamma}|$, в при $\omega = 0$ (27) отрицательно, следовательно, относительно ω^2 есть ровно одно положительное решение.

2. Если $c' < |\alpha + \frac{b}{\gamma}|$, (27) будет положительно в 0, тогда необходимо и достаточно, чтобы корни были (дискриминант положителен) и коэффициент при ω^2 был отрицательным. То есть:

$$\begin{cases} (\alpha^2 + \gamma^2 - c'^2 - 2b)^2 - 4(\alpha^2\gamma^2 + 2b\alpha\gamma + b^2 - c'^2\gamma^2) > 0 \\ \alpha^2 + \gamma^2 - c'^2 - 2b < 0 \end{cases}, \quad (30)$$

$$\begin{cases} c'^4 - 2(\alpha^2 - \gamma^2 - 2b)c'^2 + \alpha^4 - 2\alpha^2\gamma^2 + \gamma^4 - 4\alpha^2b - 8\alpha b\gamma - 4b\gamma^2 > 0 \\ c'^2 > \alpha^2 + \gamma^2 - 2b \end{cases}, \quad (31)$$

При $2\alpha b\gamma + 2b\gamma^2 + b^2 < 0$, система равносильна $c'^2 > \alpha^2 + \gamma^2 - 2b$, а иначе:

$$\begin{cases} \left[\begin{array}{l} c'^2 < \alpha^2 - \gamma^2 - 2b - 2\sqrt{2\alpha b\gamma + 2b\gamma^2 + b^2} \\ c'^2 > \alpha^2 - \gamma^2 - 2b + 2\sqrt{2\alpha b\gamma + 2b\gamma^2 + b^2} \end{array} \right], \quad (32) \\ c'^2 > \alpha^2 + \gamma^2 - 2b \end{cases}$$

$$c'^2 > \alpha^2 - \gamma^2 - 2b + 2\sqrt{2\alpha b\gamma + 2b\gamma^2 + b^2}. \quad (33)$$

Далее необходимо определить для каждого кандидата в бифуркацию его влияние на устойчивость (увеличивает или уменьшает количество собственных чисел с положительной вещественной частью). Пусть τ_0 – кандидат в бифуркацию, ему соответствуют $\omega_0, \lambda_0 = i\omega_0$. Определим знак выражения $\frac{\partial \Re(\lambda)}{\partial \tau} \Big|_{\tau=\tau_0}$, где $\Re(x)$ – вещественная часть числа x , D – характеристическое уравнение (10):

$$\frac{\partial \Re(\lambda)}{\partial \tau} \Big|_{\tau=\tau_0} = -\Re \left(\frac{\partial D}{\partial \tau} / \frac{\partial D}{\partial \lambda} \right) \Big|_{\tau=\tau_0} = -\Re \left(\frac{n(c'e^{-\lambda_0\tau_0}(\gamma + \lambda_0))^n \lambda_0}{d_1} \right), \quad (34)$$

где

$$d_1 = n((\alpha + \lambda_0)(\gamma + \lambda_0) + b)^{n-1}(\gamma + \alpha + 2\lambda_0) - n c'^n e^{-n\lambda_0\tau_0} (\gamma + \lambda_0)^{n-1} (-\tau_0(\gamma + \lambda_0) + 1). \quad (35)$$

Так как τ_0 и λ_0 удовлетворяют характеристическому уравнению, то

$$(c' e^{-\lambda_0\tau_0} (-\gamma - \lambda_0))^n = ((-\alpha - \lambda_0)(-\gamma - \lambda_0) + b)^n, \quad (36)$$

тогда

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Re(\lambda)}{\partial \tau} \Big|_{\tau=\tau_0} &= -\Re \left(\frac{((\alpha + \lambda_0)(\gamma + \lambda_0) + b)^n \lambda_0}{d_2} \right) = \\ &= -\Re \left(\frac{((\alpha + \lambda_0)(\gamma + \lambda_0) + b) \lambda_0 (\gamma + \lambda_0)}{d_3} \right), \end{aligned} \quad (37)$$

где

$$d_2 = ((\alpha + \lambda_0)(\gamma + \lambda_0) + b)^{n-1}(\gamma + \alpha + 2\lambda_0) - ((\alpha + \lambda_0)(\gamma + \lambda_0) + b)^n \left(-\tau_0 + \frac{1}{\gamma + \lambda_0} \right), \quad (38)$$

$$d_3 = \tau_0 \lambda_0^3 + (\alpha \tau_0 + 2\gamma \tau_0 + 1) \lambda_0^2 + (2\alpha \gamma \tau_0 + \gamma^2 \tau_0 + b \tau_0 + 2\gamma) \lambda_0 + \alpha \gamma^2 \tau_0 + b \gamma \tau_0 + \gamma^2 - b. \quad (39)$$

Домножим в (37) числитель и знаменатель на сопряженное к d_3 и домножим все выражение на квадрат модуля d_3 :

$$\text{sign} \left(\frac{\partial \Re(\lambda)}{\partial \tau} \Big|_{\tau=\tau_0} \right) = \text{sign} \left((\omega_0^2 + \gamma^2)^2 - (b^2 + 2\alpha b \gamma + 2b\gamma^2) \right). \quad (40)$$

Теперь видно, что условие увеличение/уменьшение количества корней с положительной вещественной частью не зависит от конкретного представителя серии τ , а является свойством всей серии или зависит только от ω . ω_0 является корнем (27):

$$\omega_0^4 + (\alpha^2 + \gamma^2 - c'^2 - 2b) \omega_0^2 + \alpha^2 \gamma^2 + 2b\alpha\gamma + b^2 - c'^2 \gamma^2 = 0, \quad (41)$$

в другом представлении:

$$(\omega_0^2 + \gamma^2)^2 + (\alpha^2 - c'^2 - \gamma^2 - 2b) (\omega_0^2 + \gamma^2) + b^2 + 2\alpha b \gamma + 2b\gamma^2 = 0. \quad (42)$$

Лемма 2. Пусть у $x^2 + ax + b = 0$ есть два вещественных корня x_1 и x_2 ($x_1 < x_2$) и $b > 0$, тогда $x_1^2 - b$ и $x_2^2 - b$ будут имеют различные знаки. И если $a > 0$, то $x_2^2 - b < 0$, а если $a < 0$, то $x_1^2 - b < 0$.

Пусть у $x^2 + ax + b = 0$ есть два вещественных корня x_1 и x_2 ($x_1 < x_2$) и $b < 0$, тогда $x_1^2 - b$ и $x_2^2 - b$ будут всегда положительны.

Подставим значения корней в $x^2 - b$:

$$\left(\frac{(-a \pm \sqrt{a^2 - 4b})}{2} \right)^2 - b = \frac{a^2 - 4b \mp a\sqrt{a^2 - 4b}}{2}, \quad (43)$$

тогда $\text{sign}(x^2 - b) = \text{sign}(\sqrt{a^2 - 4b} \mp a)$. Отсюда следуют утверждения леммы. ■

Как было получено ранее, если $|\alpha + \frac{b}{\gamma}| < c'$, т. е. одно решение (27) для ω (с точностью до знака). $|\alpha + \frac{b}{\gamma}| < c'$, значит, $\alpha < c'$, и следовательно $\alpha^2 - c'^2 - \gamma^2 - 2b < 0$. То есть среди двух корней (27) для ω^2 наш больше по модулю. Если же $|\alpha + \frac{b}{\gamma}| > c'$, то $\alpha^2 + \gamma^2 - c'^2 - 2b < 0$, следовательно и $\alpha^2 - \gamma^2 - c'^2 - 2b < 0$.

Применив лемму (2), выражение для $\text{sign}\left(\frac{\partial \Re(\lambda)}{\partial \tau}\bigg|_{\tau=\tau_0}\right)$, полученные выше для ω_0 неравенства и уравнение (пусть есть хотя бы одно решение для ω_0) получим, что $\text{sign}\left(\frac{\partial \Re(\lambda)}{\partial \tau}\bigg|_{\tau=\tau_0}\right) = -1$, тогда и только тогда, когда есть два корня (с точностью до знака) у ω и $b^2 + 2\alpha b\gamma + 2b\gamma^2 > 0$ для всех τ , соответствующих меньшему ω (большему периоду серии).

Тогда можно заключить, что:

1. Если $c > a + \frac{b}{\gamma}$, то есть три состояния равновесия ($u < 0, u = 0, u > 0$), при этом нулевое состояние равновесия будет неустойчивым для $\tau = 0$, и останется неустойчивым при увеличении τ (есть одна серия значений, меняющей количество корней с положительной вещественной частью, но она это количество только увеличивает).

2. Если $c < a + \frac{b}{\gamma}$, то есть либо одно состояние равновесия ($u = 0$), либо три ($u = 0, u > 0, u > 0$).

Для состояний равновесия получены следующие результаты:

1. Если $c' > \alpha + \gamma$ или $c' > \alpha + \frac{b}{\gamma}$, то состояние равновесия неустойчивое при $\tau = 0$. Если же $c' < \alpha + \gamma$ и $c' < \alpha + \frac{b}{\gamma}$, то оно асимптотически устойчивое.

2. Если $c' > |\alpha + \frac{b}{\gamma}|$, то (состояние равновесия неустойчивое при $\tau = 0$) состояние равновесия будет неустойчивым при любом τ (есть одна серия значений, увеличивающей количество корней с положительной вещественной частью).

3. Иначе, если $2\alpha\gamma + 2\gamma^2 + b < 0$ и $c'^2 > \alpha^2 + \gamma^2 - 2b$, то есть две серии смены количества корней с положительной вещественной частью, обе из которых увеличивают это число. Если $2\alpha\gamma + 2\gamma^2 + b > 0$ и $c'^2 > \alpha^2 - \gamma^2 - 2b + 2\sqrt{2\alpha b\gamma + 2b\gamma^2 + b^2}$, то есть две серии смены количества корней с положительной вещественной частью, одна из которых уменьшает число корней, другая увеличивает (та, что с меньшим периодом). Иначе серий смены нет, асимптотическая устойчивость состояния равновесия не зависит от τ .

Как частный случай, для нулевого состояния равновесия:

1. Если $c > a + \frac{b}{\gamma}$, то состояние равновесия будет неустойчивым при любом τ и есть еще два других состояния равновесия.

2. Если $a + \frac{b}{\gamma} > c > a + \gamma$, то состояние равновесия неустойчиво при $\tau = 0$ и есть две серии смены количества корней с положительной вещественной частью, одна из которых уменьшает число корней, другая увеличивает.

3. Если $c < a + \gamma$, то состояние равновесия асимптотически устойчиво при $\tau = 0$, при $c^2 < a^2 - \gamma^2 - 2b + 2\sqrt{2\alpha b\gamma + 2b\gamma^2 + b^2}$, таким оно останется при любом τ , иначе есть две серии смены количества корней с положительной вещественной частью, одна из которых уменьшает число корней, другая увеличивает.

В полученных результатах можно заметить, что количество и сами состояния равновесия не зависят от количества нейронов в кольце. Также и основные критерии для определения устойчивости серии кандидатов не зависят от количества нейронов. Зависит лишь период в этой серии: период равен $\frac{2\pi}{n\omega}$. Таким образом и прямая взаимосвязь между числом нейронов в кольце и периодом прохождения импульса не подтвердилась аналитически.

2.1.3. Численная проверка выводов

Введем несколько определений: последовательность первого рода – последовательность $\{\tau_k\}$ такая, что для характеристического уравнения (10) переход через значение этой после-

довательности ведет к увеличению на два количества корней с положительной вещественной частью. Аналогично введем последовательность второго рода – та, которая уменьшает на два количество корней с положительной вещественной частью.

Для получения численных решений системы использовался пакет Wolfram Mathematica и метод NDSolve. В качестве начальных значений брались нулевые функции и скачок в момент времени $t = 0$ для первого нейрона на 0.01. То есть $u_1(t|t < 0) = v_1(t|t \leq 0) = 0$, $u_1(0) = 0.01$, $u_i(t|t \leq 0) = v_i(t|t \leq 0) = 0$, $i \in [2, \dots, n]$.

Рассмотрим следующие значения параметров нейрона: $a = 0.15$, $b = \gamma = 0.02$, $c = 0.18$.

Значение $c = 0.18$ лежит между значением $c = 0.890512$, которое отделяет одно состояние равновесия от трех, и между $c = a + \gamma = 0.17$. Т. е. из полученных ранее результатов можно заключить, что вне зависимости от количества нейронов есть одно состояние равновесия ($u = 0$), которое неустойчиво при $\tau = 0$. Для этого состояния равновесия есть серия и первого, и второго рода.

Далее рассмотрим различное количество нейронов в кольце:

1) Кольцо из двух нейронов. Тогда две серии кандидатов – это $\tau_{1,k} \approx 1.70691 + 25.715009k$ второго рода, и $\tau_{2,k} \approx 14.431569 + 16.895513k$ первого рода. Тогда для этого единственного состояния равновесия получаем четыре бифуркации Хопфа: при $\tau \approx 1.70691$ – переход из неустойчивого равновесия в асимптотически устойчивое (рис. 2, 3), далее при $\tau \approx 14.431569$, $\tau \approx 27.42192$ и $\tau \approx 31.327082$ (рис. 4, 5).

2 нейрона в кольце

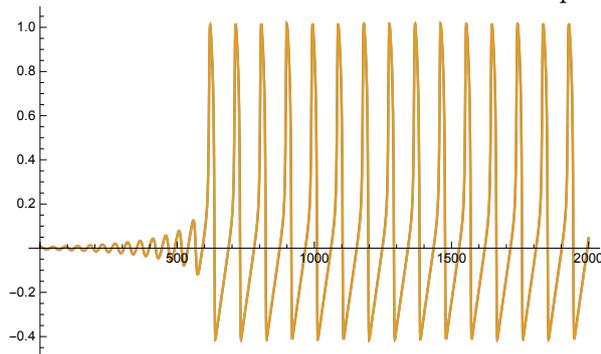


Рис. 2. $\tau = 0$

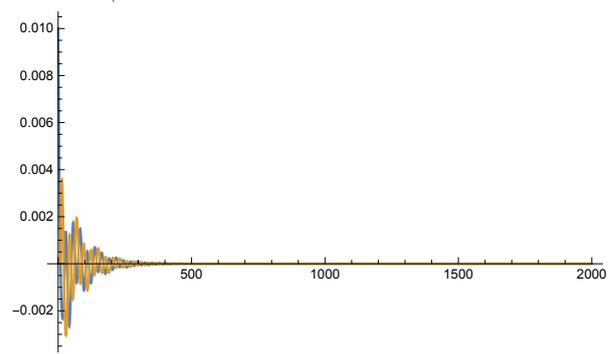


Рис. 3. $\tau = 10$

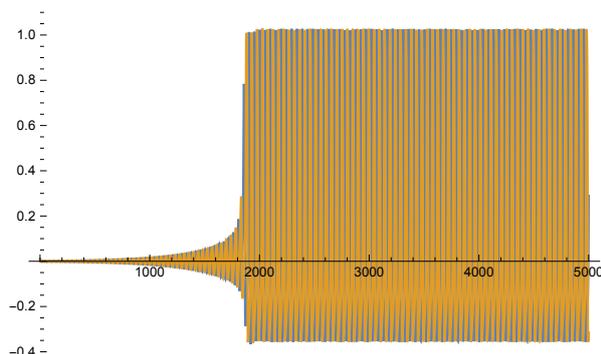


Рис. 4. $\tau = 20$

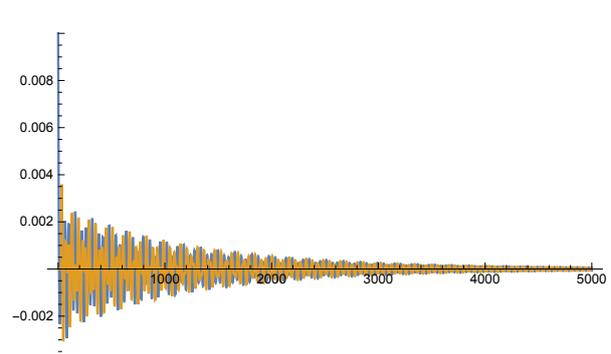


Рис. 5. $\tau = 29$

2) Кольцо из трех нейронов. Тогда две серии кандидатов – это $\tau_{1,k} \approx 1.70691 + 17.143339k$ второго рода, и $\tau_{2,k} \approx 8.799731 + 11.263675k$ первого рода. Тогда для этого единственного состояния равновесия получаем четыре бифуркации Хопфа: при $\tau \approx 1.70691$ – переход из неустойчивого равновесия в асимптотически устойчивое (рис. 6, 7), далее при $\tau \approx 8.799731$, $\tau \approx 18.850249$ и $\tau \approx 20.063406$ (рис. 8, 9).

3 нейрона в кольце

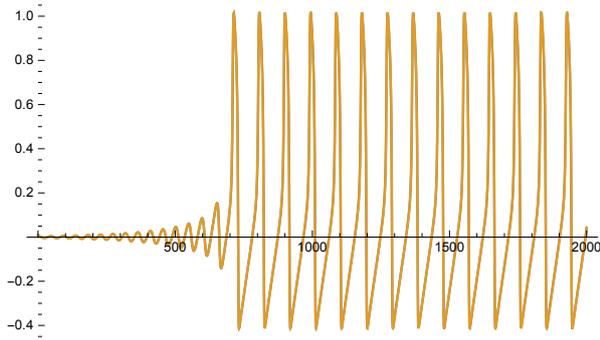


Рис. 6. $\tau = 0$

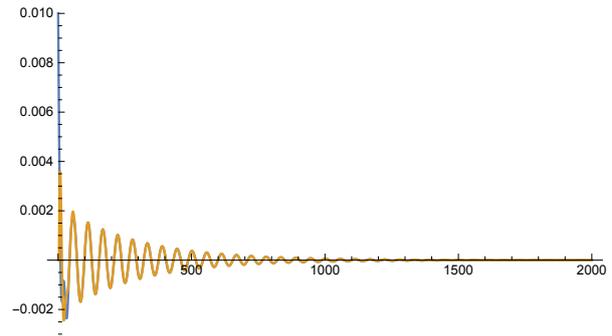


Рис. 7. $\tau = 3$

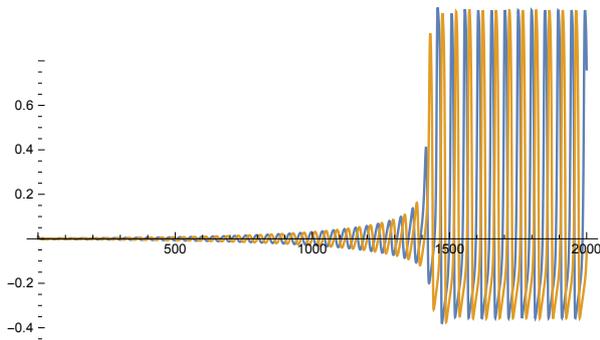


Рис. 8. $\tau = 12$

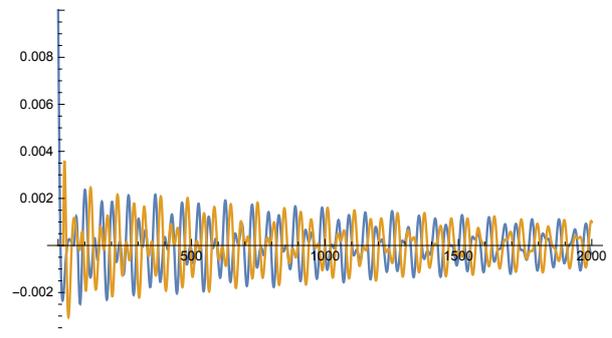


Рис. 9. $\tau = 19.3$

3) Кольцо из четырех нейронов. Тогда две серии кандидатов – это $\tau_{1,k} \approx 1.70691 + 12.857505k$ второго рода, и $\tau_{2,k} \approx 5.983812 + 8.447756k$ первого рода. Тогда для этого единственного состояния равновесия получаем две бифуркации Хопфа: при $\tau \approx 1.70691$ – переход из неустойчивого равновесия в асимптотически устойчивое (рис. 10, 11), далее при $\tau \approx 5.983812$ (рис. 12).

4 нейрона в кольце

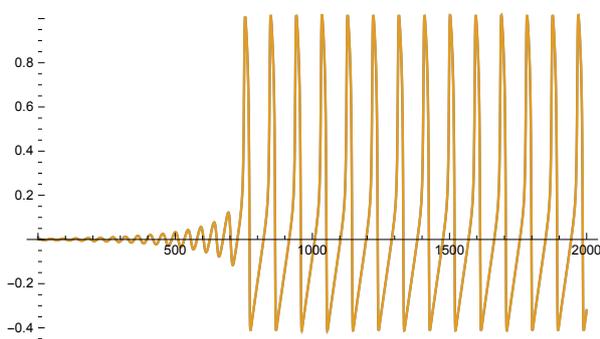


Рис. 10. $\tau = 0$

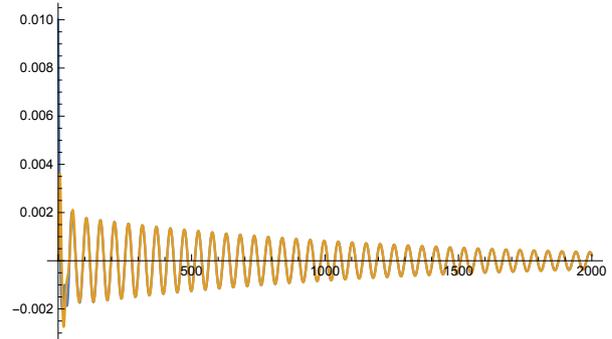


Рис. 11. $\tau = 2$

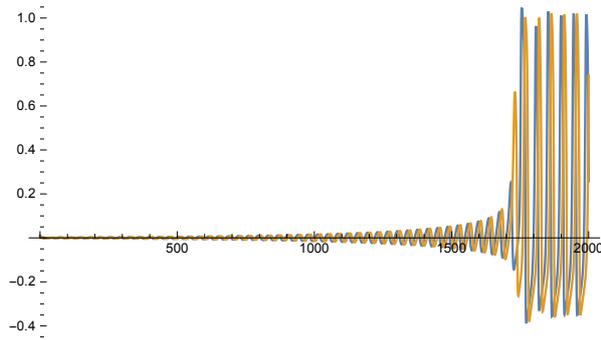


Рис. 12. $\tau = 7$

3. Заключение

В данной работе была рассмотрена система в виде ориентированного кольца из нейронов. Связь между двумя нейронами происходила с задержкой. Для описания поведения одного нейрона была использована модель ФитцХью-Нагумо и на ее основе построена итоговая модель для системы в виде кольца нейронов. Для этой системы определены состояния равновесия, получены критерии для определения устойчивости состояний равновесия и, как следствие, критерии наличия в системе периодических решений. Показано, что период собственных колебаний в кольце нейронов не имеет прямолинейной зависимости от количества нейронов в кольце. Затем все результаты проверены численно.

Определение динамического типа поведения для нелинейных систем является сложной и интересной задачей даже для описанной здесь модели. Но она является сильным упрощением реальной системы связанных биологических нейронов. В реальных системах проявляется множество эффектов, таких как различные параметры нейронов, зависимость параметров от времени, наличие шумов и отсутствие явно обособленных групп нейронов, т. е. система представляет из себя огромное количество нейронов с множеством непостоянных связей и различными параметрами. В связи с этим для реального применения результатов требуются еще теоретические и практические изыскания. Не смотря на это, результаты в виде критериев для определения типов поведения системы и способов управления поведением могут позволить детектировать нежелательные поведения, а затем избавляться от них. Также результаты могут позволить заранее предотвращать нежелательные поведения и повышать эффективность функционирования системы в целом. Поэтому продолжение исследований в данном направлении остается интересным и актуальным.

Литература

1. Schöll E., Hiller G., Hövel P., Dahlem M. Time-delayed feedback in neurosystems, *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 2009. Vol. 367, No. 1891. pp. 1079–1096.
2. Burić N., Todorović D. Dynamics of FitzHugh-Nagumo excitable systems with delayed coupling. *Physical Review E*, 2003. Vol. 67, No. 6. pp. 066222.
3. Song Z., Xu J., Zhen B. Multitype activity coexistence in an inertial two-neuron system with multiple delays. *International Journal of Bifurcation and Chaos*, 2015. Vol. 25, No. 13. pp. 1530040.

4. Xu C., Zhang Q., Wu Y. Bifurcation analysis in a three-neuron artificial neural network model with distributed delays. *Neural Processing Letters*, 2016. Vol. 44, No. 2. pp. 343–373.
5. Karaoğlu E., Yılmaz E., Merdan H. Stability and bifurcation analysis of two-neuron network with discrete and distributed delays. *Neurocomputing*, 2016. Vol. 182. pp. 102–110.
6. Xu C. Local and global Hopf bifurcation analysis on simplified bidirectional associative memory neural networks with multiple delays. *Mathematics and Computers in Simulation*, 2018. Vol. 149. pp. 69–90.
7. FitzHugh R. Impulses and physiological states in theoretical models of nerve membrane. *Biophysical journal*, 1961. Vol. 1, No. 6. pp. 445–466.
8. Nagumo J., Arimoto S., Yoshizawa S. An active pulse transmission line simulating nerve axon. *Proceedings of the IRE*, 1962. Vol. 50, No. 10. pp. 2061–2070.
9. Burić N., Grozdanović I., Vasović N., Type I vs. type II excitable systems with delayed coupling, *Chaos. Solitons and Fractals*, 2005. Vol. 23, No. 5. pp. 1221–1233.

MSC2020 37M05

Dynamic behavior for a group of biological neurons FitzHugh-Nagumo

E. G. Fedorov, I. Y. Popov

ITMO University

Abstract: In this paper, a connected and oriented ring of neurons will be considered. For such a configuration, the dependence of the dynamics of the system on the delay in impulse transmission between neurons and on the number of neurons in the ring is studied. To describe a neuron, the FitzHugh-Nagumo model is used, as a model capable of describing the main features of a biological neuron and, at the same time, is computationally relatively simple. The results obtained are verified numerically. As a result, it was shown that there is no rectilinear dependence of the period of passage of the pulse along the ring on the number of neurons in the ring. Criteria for determining local bifurcations are also obtained.

Keywords: FitzHugh-Nagumo system, time delay, neural networks, stability, Hopf bifurcations.

References

1. E. Schöll, G. Hiller, P. Hövel and M. Dahlem, Time-delayed feedback in neurosystems, *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 2009. Vol. 367, No. 1891. pp. 1079–1096.
2. N. Burić and D. Todorović, Dynamics of FitzHugh-Nagumo excitable systems with delayed coupling, *Physical Review E*, 2003. Vol. 67, No. 6. p. 066222.
3. Z. Song, J. Xu and B. Zhen, Multitype activity coexistence in an inertial two-neuron system with multiple delays, *International Journal of Bifurcation and Chaos*, 2015. Vol. 25, No. 13. p. 1530040.
4. C. Xu, Q. Zhang and Y. Wu, Bifurcation analysis in a three-neuron artificial neural network model with distributed delays, *Neural Processing Letters*, 2016. Vol. 44, No. 2. pp. 343–373.
5. E. Karaoğlu, E. Yılmaz and H. Merdan, Stability and bifurcation analysis of two-neuron network with discrete and distributed delays, *Neurocomputing*, 2016. Vol. 182. pp. 102–110.
6. C. Xu, Local and global Hopf bifurcation analysis on simplified bidirectional associative memory neural networks with multiple delays, *Mathematics and Computers in Simulation*, 2018. Vol. 149. pp. 69–90.
7. R. FitzHugh, Impulses and physiological states in theoretical models of nerve membrane, *Biophysical journal*, 1961. Vol. 1, No. 6. pp. 445–466.
8. J. Nagumo, S. Arimoto and S. Yoshizawa, An active pulse transmission line simulating nerve axon, *Proceedings of the IRE*, 1962. Vol. 50, No. 10. pp. 2061–2070.
9. N. Burić, I. Grozdanović, and N. Vasović, Type I vs. type II excitable systems with delayed coupling, *Chaos, Solitons and Fractals*, 2005. Vol. 23, No. 5. pp. 1221–1233.

УДК 517.938

Исследование резонансов в акустической модели клетки

Юрова Т. С., Попов И. Ю.

Университет ИТМО

Аннотация: В статье исследован оператор Лапласа для области с полупрозрачной границей, рассматриваемой как поверхностный потенциал. Получена асимптотика решения задачи рассеяния с особенностью на поверхности и её связь с резонансами. Достигнутый результат может быть применён для объяснения селективного разрушения мембран раковых клеток в ультразвуковом поле.

Ключевые слова: резонансы матрицы рассеяния, асимптотика.

1. Введение

Данная работа была вдохновлена явлением, открытым в 2016 году Кошелевой, Лай и др. [1]. Они установили, что при облучении ультразвуком раковых и здоровых клеток с внедренными в них наночастицами золота количество погибших раковых клеток значительно больше, чем погибших здоровых. Такой метод лечения раковых опухолей является более безопасным по сравнению со всеми существующими методами, так как минимально влияет на здоровые клетки. Это явление было описано сугубо экспериментально, теоретического обоснования представлено не было. В данной статье разработана теоретическая модель рассеяния акустических волн клеточной мембраной и обоснована эффективность избирательного разрушения раковых клеток с помощью ультразвукового метода и внедрения в клетки золотых наночастиц.

Для исследования упомянутого выше явления необходимо построить акустическую модель клетки. Различные модели клеточных мембран конструировались и исследовались в работах [2–4]. В данной работе она представляет собой резонатор с тонкими полупрозрачными границами, в окрестности которых находятся наночастицы – точечные источники вторичных акустических волн. Главное различие в моделях раковой и здоровой клеток состоит в гладкости клеточной мембраны, т. е. границы: у здоровой клетки она гладкая, у раковой – негладкая [5]. В этой модели рассматривается задача рассеяния акустических волн и оценивается мнимая часть резонансов – полюсов матрицы рассеяния.

2. Исследование резонансов

Перейдём к исследованию резонансов. Чтобы найти их в явном виде, необходимо решить уравнение

$$S(k)e = 0,$$

где S – матрица рассеяния задачи. Учитывая вид матрицы рассеяния, задача ставится следующим образом: нужно найти такие значения спектрального параметра k , при которых

существуют решения уравнения

$$\int_{\Sigma_1} S(\nu, \nu', k) e(\nu') d\nu' + \frac{ik}{2\pi} c\psi(x_0, \nu, k) \times \\ \times \int_{\Sigma_1} \psi(x_0, \nu', k) e(\nu') d\nu' = 0 \quad (1)$$

т.е. требуется найти такие $e, e \in (L_2(\Sigma_1), \Sigma_1 = \{\nu : |\nu| = 1\})$, $x_0 \in \Gamma$ – точка, в которой находится наночастица.

Согласно [6], уравнение (1) преобразовано следующим образом

$$e(\nu'') = -\frac{ik}{2\pi} \int_{\Sigma_1} d\nu [S]^{-1}(\nu'', \nu, k) \times \\ \times \int_{\Sigma_1} c\psi(x_0, \nu, k) \psi(x_0, \nu', k) e(\nu') d\nu',$$

где $[S]^{-1}(\nu'', \nu, k)$ – ядро оператора $[S]^{-1}$. У оператор-функции $S(k)$ с обобщённым ядром $S(\nu, \nu', k)$ невозмущенной задачи нет корней в полосе $0 \leq \text{Im } k \leq \delta$ в верхней полуплоскости k [7, 8]. Поэтому по принципу симметрии этот оператор продолжается в полосу $|\text{Im } k| \leq \delta$ и является обратимой и ограниченной оператор-функцией. С использованием следующего соотношения

$$([S]^{-1}(k)\psi)(x, \nu'', k) = \overline{\psi(x, \nu'', \bar{k})}$$

получим

$$e(\nu'') = -\frac{ik}{2\pi} \overline{c\psi(x_0, \nu'', \bar{k})} \int_{\Sigma_1} d\nu' \psi(x_0, \nu', k) e(\nu') d\nu'. \quad (2)$$

Допустим, что $k_{n_0}^2 = \lambda_{n_0}$ – собственные значения рассеивателя. Рассмотрим уравнение (2) вблизи одного из таких значений. При этом коэффициент c выражается через функцию $D(k)$ следующего вида

$$D(k) = \lim_{x \rightarrow x_0} (G(x, x_0, k) - \text{Re } G(x, x_0, k_0)).$$

Следовательно, необходимо рассмотреть поведение этой функции в окрестности k_{n_0} . Для этого воспользуемся формулой Рисса-Герглотца и преобразованием Фурье

$$D(k) = \int \left(\frac{1}{s - \lambda} - \left(\frac{1}{s - \lambda_0} + \frac{1}{s - \bar{\lambda}_0} \right) \right) d\xi_s(x_0, x_0), \quad (3)$$

где $\xi_s(x_0, x_0)$ – ядро спектрального проектора, которое допускает представление

$$\xi(x, y) = \frac{1}{8\pi^2} \int_{|\mathcal{z}| < s} \varphi(x, \mathcal{z}) \overline{\varphi(y, \mathcal{z})} d^3 \mathcal{z}.$$

Таким образом, уравнение (3) преобразовывается в

$$D(k) = \frac{1}{8\pi^2} \int_0^\infty \sqrt{s} ds \left[\frac{1}{s - \lambda} - \frac{s}{(s - \sigma_0)^2 + \delta_0^2} \right] \int_{\Sigma_1} |\varphi(x_0, \nu, \sqrt{s})|^2 d\nu, \\ \lambda_0 = \sigma_0 + i\delta_0.$$

Отметим следующую особенность

$$D(k) = O((\lambda - \lambda_n)^0).$$

Из этого следует

$$\frac{c}{k^2 - k_{n_0}^2} = c_{n_0} + o\left((k^2 - k_{n_0}^2)^0\right), \quad c_{n_0} = \lim_{k \rightarrow k_{n_0}} \frac{c}{k^2 - k_{n_0}^2}. \quad (4)$$

Тогда с учётом (4) уравнение (2) принимает следующий вид

$$e(\nu'') = \frac{-ik}{2\pi} (k^2 - k_{n_0}^2) \int_{\Sigma_1} c(k^2 - k_{n_0}^2) \times \\ \times \overline{\psi(x_0, \nu'', \bar{k})} \psi(x_0, \nu', k) e(\nu') d\nu'. \quad (5)$$

Нетривиальное решение уравнения (5) существует при равенстве нулю определителя Фредгольма. Следовательно, если $k - k_{n_0}$ мало, то его можно представить в виде

$$1 = -\frac{ik}{2\pi} (k^2 - k_{n_0}^2) \int_{\Sigma_1} c_{n_0} \overline{\psi(x_0, \nu, \bar{k})} \psi(x_0, \nu, k) d\nu. \quad (6)$$

Таким образом, в окрестности $k = k_{n_0}$ при приближении $k \approx k_n, k + k_n \approx 2k_n$, найдем решение $k = k_n$ уравнения (6)

$$k_n = k_{n_0} + \frac{i\pi}{k_{n_0}^2 c_n \int_{\Sigma_1} |\psi^{ex}(x_0, \nu, k_{n_0})|^2 d\nu} + o\left((k^2 - k_{n_0}^2)^0\right). \quad (7)$$

3. Оценка модуля волновой функции

Волновую функцию данной задачи можно представить в виде суммы падающей и рассеянной волн:

$$\psi^{ex}(x, \nu, k) = e^{ik|x|} + \psi_0^{ex}(x, \nu, k). \quad (8)$$

Рассеянную волну ищем в виде потенциала простого слоя

$$\psi_0^{ex}(x, \nu, k) = \int_{\Gamma} \rho(s, \nu) \frac{e^{ik|x-s|}}{4\pi|x-s|} ds.$$

Эта функция удовлетворяет следующей краевой задаче:

$$\Delta \psi_0^{ex} + k^2 \psi_0^{ex} = 0 \\ \frac{\partial \psi_0^{ex}}{\partial n} \Big|_{\Gamma_+} - \frac{\partial \psi_0^{ex}}{\partial n} \Big|_{\Gamma_-} = \alpha \psi_0^{ex} + \alpha e^{ik|x|}. \quad (9)$$

Далее подставим во второе уравнение системы (9) нормальную производную потенциала простого слоя

$$\frac{\partial \psi_0^{ex}}{\partial n} \Big|_{\Gamma_+} - \frac{\partial \psi_0^{ex}}{\partial n} \Big|_{\Gamma_-} = 2\pi \rho(x, \nu) + \\ + \int_{\Gamma} \rho(s, \nu) \left(ik - \frac{1}{|x-s|} \right) \cos(n_x, x-s) \frac{e^{ik|x-s|}}{4\pi|x-s|} ds \quad (10)$$

и получим интегральное уравнение

$$\rho(x, \nu) + \int_{\Gamma} \rho(s, \nu) \left(\cos(n_x, x-s) \left(ik - \frac{1}{|x-s|} \right) - \alpha \right) \times \\ \times \frac{e^{ik|x-s|}}{4\pi|x-s|} ds = \alpha e^{ik|x|}. \quad (11)$$

Решим уравнение (11) с помощью метода итераций. Для этого преобразуем его в следующий вид

$$\begin{aligned}
 & \rho(x, \nu) - \alpha e^{ik|x|} + \alpha \int_{\Gamma} \left(\left(ik - \frac{1}{|x-s|} \right) \cos(n_x, x-s) - \alpha \right) \frac{e^{ik(|x-s|+|s|)}}{4\pi|x-s|} ds + \\
 & + \int_{\Gamma} \left(\rho(s, \nu) - \alpha e^{ik|s|} + \left(\left(ik - \frac{1}{|x-s|} \right) \cos(n_x, x-s) - \alpha \right) \frac{e^{ik(|x-s|)}}{4\pi|x-s|} ds \right) \times \\
 & \times \alpha \int_{\Gamma} \left(\left(\left(ik - \frac{1}{|s-t|} \right) \cos(n_s, s-t) - \alpha \right) \frac{e^{ik(|s-t|+|t|)}}{4\pi|s-t|} dt \right) + \\
 & + \int_{\Gamma} \left(\alpha e^{ik|s|} - \left(\left(ik - \frac{1}{|x-s|} \right) \cos(n_x, x-s) - \alpha \right) \frac{e^{ik(|x-s|)}}{4\pi|x-s|} ds \right) \times \\
 & \times \alpha \int_{\Gamma} \left(\left(\left(ik - \frac{1}{|s-t|} \right) \cos(n_s, s-t) - \alpha \right) \frac{e^{ik(|s-t|+|t|)}}{4\pi|s-t|} dt \right) = 0.
 \end{aligned} \tag{12}$$

Обозначим последний член уравнения (12) за $\sigma_0(x, \nu)$

$$\begin{aligned}
 \sigma_0(x, \nu) = & - \int_{\Gamma} \left(\alpha e^{ik|s|} - \left(\left(ik - \frac{1}{|x-s|} \right) \cos(n_x, x-s) - \alpha \right) \frac{e^{ik(|x-s|)}}{4\pi|x-s|} ds \right) \times \\
 & \times \alpha \int_{\Gamma} \left(\left(\left(ik - \frac{1}{|s-t|} \right) \cos(n_s, s-t) - \alpha \right) \frac{e^{ik(|s-t|+|t|)}}{4\pi|s-t|} dt \right).
 \end{aligned}$$

Заметим, что

$$\int_{\Gamma} \frac{dt}{|s-t|} = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^R \frac{r dr}{|s-r|} \leq C,$$

тогда

$$|\sigma_0(x, \nu)| \leq C \int_{\Gamma} |x-s|^{-1} ds.$$

Таким образом

$$\sigma_0(x, \nu) \in C^\beta, \quad (0 < \beta < 1). \tag{13}$$

Обозначим за $\sigma(x, \nu)$ следующее выражение из уравнения (12), связанное с функцией $\rho(x, \nu)$

$$\begin{aligned}
 \sigma(x, \nu) = & \rho(x, \nu) - \alpha e^{ik|x|} - \\
 & - \alpha \int_{\Gamma} \left(\left(\left(ik - \frac{1}{|x-s|} \right) \cos(n_x, x-s) - \alpha \right) \frac{e^{ik(|x-s|+|s|)}}{4\pi|x-s|} ds \right).
 \end{aligned}$$

Следуя методу итерации, приходим к следующему уравнению для $\sigma(x, \nu)$

$$\begin{aligned}
 \sigma(x, \nu) + \int_{\Gamma} \sigma(s, \nu) \left(\left(\left(ik - \frac{1}{|x-s|} \right) \cos(n_x, x-s) - \alpha \right) \times \right. \\
 \left. \times \frac{e^{ik|x-s|}}{4\pi|x-s|} ds \right) = \sigma_0(x, \nu) \quad x \in \Gamma.
 \end{aligned} \tag{14}$$

Заметим, что ядро интегрального уравнения (14) имеет слабую особенность $|x-s|^{-1}$, из чего следует, что такой оператор вполне непрерывен в $L_2(\Gamma)$. Тогда, учитывая (13), по теореме Фредгольма интегральное уравнение (14) имеет решение в $C^\beta(\Gamma)$, если соответствующее однородное уравнение

$$\hat{\sigma}(x) + \int_{\Gamma} \left(ik - \frac{1}{|x-s|} \right) \frac{e^{ik|x-s|}}{4\pi|x-s|} \cos(n_x, x-s) \hat{\sigma}(s) ds = 0$$

имеет только тривиальное решение. Однако следует отметить, что нетривиальным решением этого уравнения может быть функция u следующей задачи

$$\begin{cases} -\Delta u = k^2 u, \\ \frac{\partial u}{\partial n} \Big|_{\Gamma_+} - \frac{\partial u}{\partial n} \Big|_{\Gamma_-} = 0, \end{cases} \quad u(x) = \int_{\Gamma} \frac{e^{ik|x-s|}}{4\pi|x-s|} \hat{\sigma}(s) ds.$$

Предположим, что k^2 не является собственными значениями возмущенного лапласиана, поэтому однородное интегральное уравнение имеет только тривиальное решение.

Таким образом, приходим к следующему виду для волновой функции данной задачи

$$\begin{aligned} \psi^{ex}(x, \nu, k) &= e^{ik|x|} + \alpha \int_{\Gamma} \frac{e^{ik(|x-s|-|s|)}}{4\pi|x-s|} ds + \alpha \int_{\Gamma} ds \frac{e^{ik|x-s|}}{4\pi|x-s|} \times \\ &\times \int_{\Gamma} dt \left(\left(ik - \frac{1}{|s-t|} \right) \cos(n_s, s-t) - \alpha \right) \frac{e^{ik(|s-t|+|t|)}}{4\pi|s-t|} + \\ &+ \int_{\Gamma} \sigma(s, \nu) \frac{e^{ik|s-x|}}{4\pi|s-x|} ds. \end{aligned} \quad (15)$$

Заметим, что последние два члена в выражении (15) являются гладкими функциями класса C^β и $C^{\beta+1}$ соответственно. Рассмотрим более подробно второй интеграл в выражении (15). Перейдём к полярным координатам r, φ на касательной плоскости в окрестности точки x_0

$$\begin{aligned} I(x, x_0) &= \alpha \int_{\Gamma} \frac{e^{ik(|x-s|-|s|)}}{4\pi|x-s|} ds = \alpha \int_{\Gamma} \frac{ds}{4\pi|x-s|} + O(|x|^0) = \\ &= \alpha \sqrt{1+L^2+N^2} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^R \frac{r dr}{|x-r|} + O(|x|^0) = \\ &= \alpha \sqrt{1+L^2+N^2} \cdot C + O(|x|^0), \end{aligned}$$

где L, N – коэффициенты второй квадратичной формы касательной поверхности в точке x_0 , а C – некоторая константа. Таким образом, можно сформулировать теорему.

Теорема 1. Пусть Ω – ограниченная область с гладкой границей $\Gamma \in C^\beta, \beta > 3$. Рассмотрим оператор Лапласа в пространстве $L_2(\mathbf{R}^3)$, возмущённый поверхностным потенциалом на Γ . Его собственные функции из пространства Соболева $W_2^2(\mathbf{R}^3)$ и удовлетворяют следующим граничным условиям на Γ :

$$\begin{aligned} v|_{\Gamma_+} &= v|_{\Gamma_-}, \\ \frac{\partial v}{\partial n} \Big|_{\Gamma_+} - \frac{\partial v}{\partial n} \Big|_{\Gamma_-} &= \alpha v|_{\Gamma_-}. \end{aligned} \quad (16)$$

Решение задачи рассеяния представляется в виде:

$$\psi^{ex}(x, \nu, k) = e^{ik|x|} + \alpha \text{const} \sqrt{1+L^2+N^2} + O(|x|^0), \quad (17)$$

где L, N – коэффициенты второй квадратичной формы касательной поверхности в точке $x_0 \in \Gamma = \partial\Omega$.

4. Выводы

Проанализируем вклад полной волновой функции акустического рассеяния клеточной мембраны раковой и здоровой клеток с учетом уравнения (7).

Сравним получившееся решение задачи рассеяния (17) для здоровой и раковой клетки в случае гладкой поверхности Γ с малой кривизной и в случае негладкой поверхности Γ с большой кривизной в точке x_0 . Из постановки задачи (8) видно, что первый член представляет собой падающую волну и не отличается для обоих случаев. Однако при анализе следующего члена (17) можно проследить, что он становится значительно больше с увеличением кривизны поверхности.

Далее проанализируем полученный вид спектрального параметра и вклад волновой функции в его значение (7). В этой формуле (7) модуль волновой функции присутствует только в знаменателе мнимой части k_{n_0} . Следовательно, при увеличении модуля волновой функции значение мнимой части уменьшается. Соответственно, для случая поверхности Γ с большой кривизной мнимая часть становится меньше, чем для случая поверхности Γ с малой кривизной. При уменьшении мнимой части резонансов увеличивается время их жизни, поэтому такие состояния вызывают более разрушительный эффект. Таким образом, под действием резонансов разрушение раковых клеток более вероятно, чем разрушение здоровых.

Литература

1. Kosheleva O. K., Lai T.-C., Chen N. G., Hsiao M., Chen C.-H. Selective killing of cancer cells by nanoparticle-assisted ultrasound // *J. Nanobiotechnology*. 2016. Vol. 14, No. 1. pp. 46.
2. Chaffey N. Alberts B., Johnson A., Lewis J., Raff M., Roberts K., Walter P. *Molecular biology of the cell*. 4th edn. // *Ann. Bot.* 2003. Vol. 91. p. 401.
3. Baumgart T., Hess S. T., Webb W. W. Imaging coexisting fluid domains in biomembrane models coupling curvature and line tension // *Nature*. 2003. Vol. 425, No. 6960. pp. 821–824.
4. Melikhov I. F., Popov I. Y. Model of cell membrane in ultrasonic field // *Chinese J. Phys.* 2020. Vol. 65. pp. 334–340.
5. Vantangoli M. M., Madnick S. J. MCF-7 human breast cancer cells form differentiated microtissues in scaffold-free hydrogels // *PLoS One*. 2015. Vol. 10, No. 8.
6. Лакс П., Филлипс Р. Теория рассеяния. М.: Мир, 1971. С. 309.
7. Popov I. Y. The Extension Theory, Domains with Semitransparent Surface and the Model of Quantum Dot // *Proc. R. Soc. A Math. Phys. Eng. Sci.* 1996. Vol. 452. pp. 1505–1515.
8. Behrndt J. Neidhardt H. Scattering matrices and Weyl functions of quasi boundary triples // *Operator Theory: Advances and Applications* / ed. by P. Kurasov, A. Laptev, S. Naboko, B. Simon. 2020. Vol. 276. pp. 162–182. DOI: 10.1007/978-3-030-31531-312

MSC2020 35Q92

Investigation of resonances in the acoustic model of the cell

T. S. Yurova, I. Y. Popov

ITMO University

Abstract: We study the Laplace operator for the domain with semitransparent boundary considered as a potential supported by a surface. The asymptotic of the solution of the scattering problem with a singularity on the surface and its relation to resonances are obtained. An application of the result can be explaining the selective destruction of cancer cell membranes in an ultrasound field.

Keywords: resonances of the scattering matrix, asymptotic.

References

1. O. K. Kosheleva, T.-C. Lai, N. G. Chen, M. Hsiao, C.-H. Chen. Selective killing of cancer cells by nanoparticle-assisted ultrasound // *J. Nanobiotechnology*. 2016. Vol. 14, No. 1. pp. 46.
2. N. Chaffey, B. Alberts, A. Johnson, J. Lewis, M. Raff, K. Roberts, P. Walter. *Molecular biology of the cell*. 4th edn. // *Ann. Bot.* 2003. Vol. 91. p. 401.
3. T. Baumgart, S. T. Hess, W. W. Webb. Imaging coexisting fluid domains in biomembrane models coupling curvature and line tension // *Nature*. 2003. Vol. 425, No. 6960. pp. 821–824.
4. I. F. Melikhov, I. Y. Popov. Model of cell membrane in ultrasonic field // *Chinese J. Phys.* 2020. Vol. 65. pp. 334–340.
5. M. M. Vantangoli, S. J. Madnick. MCF-7 human breast cancer cells form differentiated microtissues in scaffold-free hydrogels // *PLoS One*. 2015. Vol. 10, No. 8.
6. P. D. Lax, R. S. Phillips. *Scattering theory*. New York-London: Academic Press, 1967. 309 p.
7. I. Y. Popov. The Extension Theory, Domains with Semitransparent Surface and the Model of Quantum Dot // *Proc. R. Soc. A Math. Phys. Eng. Sci.* 1996. Vol. 452. pp. 1505–1515.
8. J. Behrndt, H. Neidhardt. Scattering matrices and Weyl functions of quasi boundary triples // *Operator Theory: Advances and Applications* / ed. by P. Kurasov, A. Laptev, S. Naboko, B. Simon. 2020. Vol. 276. pp. 162–182. DOI: 10.1007/978-3-030-31531-312

Научное электронное издание

**ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫЕ УРАВНЕНИЯ И ИХ ПРИЛОЖЕНИЯ
В МАТЕМАТИЧЕСКОМ МОДЕЛИРОВАНИИ**

**СБОРНИК МАТЕРИАЛОВ
XV МЕЖДУНАРОДНОЙ НАУЧНОЙ КОНФЕРЕНЦИИ**

Саранск
15 – 18 июля 2021 г.

Редакторы: Пескова Е.Е., Язовцева О.С.

Формат 60×84 1/16

Усл. печ. л. 12,26

Подписано в печать 30.11.2021

Средне-Волжское математическое общество

Национальный исследовательский Мордовский государственный университет

430005, Республика Мордовия, г. Саранск, ул. Большевистская, 68

