

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ ЗАДАЧИ ВОЛНОВОЙ ФИЗИКИ

Метод крупных частиц как инструмент численного анализа <i>Л.В. Бородачев</i>	1
Приближенное решение нелинейного волнового уравнения <i>Д.А. Евсеев</i>	4
Численное решение двумерной задачи с подвижной границей для моделирования активного движения клетки <i>П.О. Буклемишев, В.В. Черник</i>	6
Оптимизация разложения в конечный ряд Фурье однонаправленного широкоугольного пропегатора <i>Е.О. Коннова, П.В. Юлдашев, В.А. Хохлова</i>	8
Формирование бегущего биона уравнения Гинзбурга-Ландау-Хиггса в процессе столкновения кинков <i>Д.В. Завьялов, В.И. Конченков, С.В. Крючков, Е.С. Сивашов</i>	10
Скорости химических реакций в базе данных ТЕФИС по теплофизическим свойствам плотной плазмы <i>О.И. Топор, А.А. Белов, Л.В. Бородачев</i>	12
Построение сингулярной части электромагнитного поля в окрестности ребра цилиндра с произвольной формой сечения для различных типов граничных условий <i>М.М. Шушарин, И.Е. Могилевский, А.Н. Боголюбов</i>	14
Прецизионный расчет одномерных квадратур <i>М.А. Тинтул, В.С. Хохлачев, А.А. Белов</i>	17

Метод крупных частиц как инструмент численного анализа.

Л.В. Бородачев

Физический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова

borodach2000@mail.ru

Метод крупных (Макро) Частиц (ММЧ) является представителем специфического класса численных методов, отличительную черту которых составляет имитационный характер моделей, получаемых на их основе. Его появление было связано с необходимостью достоверного виртуального представления сложных физических эффектов в тех областях, где традиционные методы математического исследования оказывались либо бесполезны, либо крайне неэкономичны.

Идеология метода крупных частиц базируется на предпосылке Власова [1] о том, что эволюция начального состояния любой совокупности реальных заряженных частиц достаточно хорошо описывается с помощью фазовых траекторий малого ансамбля макрочарядов (пакетов реальных частиц), движущихся в порождаемых ими самосогласованных электромагнитных полях. В настоящей практике концепция имеет форму PIC алгоритма, сочетающего численное интегрирование уравнений движения частиц конечного размера под действием силы Лоренца с вычислением на сетке самосогласованных электромагнитных полей через источники, роль которых играют плотности заряда и тока, обусловленные неравновесным распределением самих частиц.

Физическим основанием замены реальной плазмы ансамблем макрочарядов служит сохранение ее базовых пространственно-временных параметров: плазменных и циклотронных частот, дебаевского и усредненного ларморовского радиусов.

Основные вопросы математического обоснования метода легко проявляются, если решение по ММЧ рассматривать как аппроксимацию точного решения начальной задачи для уравнения Власова на лагранжевой сетке в виде совокупности взаимодействующих макрочарядов: вид и область сходимости, а также погрешность численного решения. Отметим, что в настоящее время доказана слабая локальная сходимость решения по методу макрочастиц к классическому решению системы уравнений Власова - Пуассона. Также установлено, что дискретная функция распределения, полученная по ММЧ аппроксимирует решение уравнения Власова с точностью порядка обратной дебаевской плотности макрочарядов. При этом общая схема ММЧ явно имитирует самосогласованную эволюцию системы зарядов и внутренних электромагнитных полей, точно отражая внутренний смысл терминологии "вычислительный эксперимент".

Оценим вышесказанное с позиций методологии численного расчета. Прежде всего, в реальных численных исследованиях, всегда рассматриваются ограниченные области фазового пространства, конечные временные интервалы и сравнительно небольшие ансамбли модельных (крупных) частиц. При этом как результат расчета нас интересует не столько сама функция распределения частиц, сколько ее первые моменты, имеющие смысл плотности заряда, средней скорости частиц, температуры и т.п. Таким образом, с практической точки зрения достигнутый уровень математического обоснования ММЧ

нас устраивает, не смотря на некоторую его незавершенность (в частности, отсутствуют теоремы сходимости в общей электромагнитной постановке).

Вместе с тем, определенная не конструктивность существующих оценок как скорости сходимости дискретного решения к точному, так и физической адекватности численных результатов (обуславливающая их во многом качественный характер) объясняет необходимость дальнейшего совершенствования метода крупных частиц. В этой связи отметим, что в типичном компьютерном эксперименте порядка 90% вычислительных затрат приходится на продвижение частиц. Таким образом, оптимизация динамической части PIC алгоритма дает существенную экономию всех счетных ресурсов. Это определило одно из направлений работ, способствовавших развитию метода. Отметим ряд полученных результатов.

Предложена и алгоритмически реализована методика рационального динамического сопряжения в текущем счетном прогоне явной (экономичной, но условно устойчивой) и неявной (безусловно устойчивой, но менее экономичной) схем [2]. Выбор той или иной схемы определен величиной временного шага τ , физически адекватного конкретной стадии исследуемого процесса. При построении алгоритма использована ранее построенная экономичная неявная симметричная схема 2-ого порядка точности, в основе которой лежит редукция магнитной составляющей силы Лоренца [3]. Результатом использования методики явилось сокращение времени симуляции (в сравнении со "сплошным" проходом по явной схеме) примерно на треть.

Разработан эффективный подход к распараллеливанию PIC алгоритмов, названный Методом Разделения Частиц [4]. Здесь, в отличие от традиционно используемого Метода Декомпозиции Области, все частицы дискретной плазменной модели равными долями распределяются по вычислительным узлам, каждый из которых обладает собственной копией сеточных значений полей. По завершении временного шага эволюции самосогласованной системы эти узлы суммируют вклады своих частиц в единые массивы значений источников (плотности заряда, тока и т.д.), которые передаются на корневой узел для решения полевых уравнений с последующей обратной широковежательной рассылкой найденных значений полей, определяющих новое продвижение частиц.

Эти новации были реализованы в комплексе программ дискретного моделирования разреженной плазмы **DARWIN**. Разработанный пакет включает 1.5-мерный последовательный код, ориентированный на компьютеры индивидуального пользования, и 2.5-мерный параллельный код, ориентированный на супер-компьютеры с распределенной памятью, в частности кластеры ВЦ МГУ.

На базе созданного аппарата совместно с ведущими НИИ РАН выполнены численные исследования ряда фундаментальных явлений физики плазмы [5-7]. В частности, высокочастотного диамагнетизма потенциальных циклотронных волн (мод Бернштейна) — нелинейного явления, заключающегося в вытеснении магнитного поля из областей локализации электронно-циклотронных колебаний [8]. Эта работа особенно примечательна с позиций идеологии математического моделирования. Здесь методом вычислительного эксперимента, не зависящим от ограничений теории, впервые доказана справедливость ранее выдвинутой концепции высокочастотного диамагнитного эффекта [9], наглядно продемонстрировано его существование и получены оценки параметров, позволившие далее обнаружить это явление и в натурном эксперименте [10].

ЛИТЕРАТУРА

1. А.А. Власов «Теория многих частиц» М.-Л.: ГИТТЛ, 1950.
2. Л.В. Бородачев, С.С. Анненков // УЗФФ МГУ. 2021. № 4. С. 2440801.
3. Л.В. Бородачев // ЖВМиМФ. 1991. Т. 31. № 6. С. 934.
4. Л.В. Бородачев, Д.О. Коломиец // Комп. Иссл. и Мод. 2015. Т. 7. № 7. С. 61.
5. Л.В. Бородачев, В.Т. Тихончук // Физика плазмы. 1993. Т. 19. № 6. С. 813.
6. L.V. Vorodachev, D.O. Kolomiets // J. Plasma Phys. 2011. V. 77. P. 277.
7. Л.В. Бородачев // Известия РАН. Сер. Физическая. 2018. Т. 82. № 1. С. 92.
8. Л.В. Бородачев, А.К. Некрасов // Вестник МГУ. Сер. 3. 1984. Т. 25. № 5. С. 91.
9. Л.В. Бородачев, А.К. Некрасов, Ю.С. Сигов М. 1981. (Пр. ИПМ АН СССР № 23).
10. Ю.Г. Залеский et al. // Письма в ЖЭТФ. 1982. Т. 35. № 7. С. 281.

Приближенное решение нелинейного волнового уравнения

Д.А. Евсеев

¹Ульяновский государственный университет
Comrade-dmitriy@mail.ru

В работе предлагается исследовать эффекты, возникающие при учете нелинейной поляризации среды на примере распространения поверхностной электромагнитной волны вдоль плоской границы нелинейной среды и линейного диэлектрика, а также прохождения волны сквозь тонкую пластинку нелинейной среды. Для приближенного решения нелинейного уравнения предполагается применять метод разложения по малому параметру для колебательных систем, который изложен в [1,2]. Диэлектрический отклик среды предполагается квадратичным [3]:

$$\varepsilon(E, \omega) = \frac{\varepsilon_0 \omega_T^2}{\omega_T^2 \left(1 + \frac{|E|^2}{E_a^2}\right) - \omega^2 + i\gamma\omega} = \frac{\varepsilon_0}{f(\omega)} \frac{1}{1 + \frac{\alpha}{f(\omega)} |E|^2} \quad (1)$$

, где ε_0 - статическая диэлектрическая проницаемость нелинейной среды, ω_T - ее частота мягкой моды, γ - коэффициент собственного поглощения, ω - частота основной волны, E_a - характерная величина нелинейности электрического поля. Для удобства обозначим частотную зависимость диэлектрической проницаемости новой функцией частоты $f(\omega) = \omega_T^{-2} (\omega_T^2 - \omega^2 + i\gamma\omega)$, а в качестве малого параметра возьмем обратный квадрат E_a , иными словами $\alpha = E_a^{-2}$. Если отбросить вклад нелинейности, то получится классическая формула диэлектрической проницаемости модели Друде-Лоренца. Для простоты изложения рассмотрим распространение плоской волны в неограниченной нелинейной среде с нелинейностью типа (1). С учетом нелинейного воздействия пропорционального $|E|^2$ получим из уравнений Максвелла волновое уравнение:

$$\Delta \vec{E} - \frac{\varepsilon_0 \mu}{c^2} \frac{1}{f(\omega)} \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} = 0 \quad (2)$$

Только благодаря наличию модуля, знаменатель можно вынести за знак производной по времени и в дальнейшем положить зависимость решения от времени пропорциональную $e^{i\omega t}$. Заранее выберем ось Ox вдоль направления распространения волны. Умножив (2) на знаменатель, можно перенести единственное слагаемое пропорциональное малому параметру α в правую часть и получить итоговую запись:

$$\frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial x^2} + k_0^2 \frac{\varepsilon_0 \mu}{f(\omega)} \vec{E} = -\frac{\alpha}{f(\omega)} |E|^2 \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial x^2} \quad (3)$$

, где k_0 - величина волнового вектора. Стоит отметить, что уравнение точное и его точное решение удастся получить лишь в квадратурах, что затрудняет его дальнейший анализ. Приближенное же решение можно найти в виде бесконечного разложения по степеням малого параметра α , то есть $\vec{E} = \sum_j \alpha^j \vec{E}_j = \vec{E}_0 + \alpha \vec{E}_1 + \alpha^2 \vec{E}_2 + \alpha^3 \vec{E}_3 + \dots$. Здесь напряженности \vec{E}_j есть гармонические функции с частотами, кратными круговой

частоте p таким образом, что $p^2 = k_0^2 \frac{\varepsilon_0 \mu}{f(\omega)} + \alpha b_1 + \alpha^2 b_2 + \alpha^3 b_3 + \dots$. После замены

величин \vec{E} и $k_0^2 \frac{\varepsilon_0 \mu}{f(\omega)}$ нелинейное уравнение (3) разобьется на бесконечную цепочку

последовательно зацепленных друг за другом неоднородных линейных дифференциальных уравнений второго порядка:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial^2 \vec{E}_0}{\partial x^2} + p^2 \vec{E}_0 = 0 \\ \frac{\partial^2 \vec{E}_1}{\partial x^2} + p^2 \vec{E}_1 = b_1 \vec{E}_0 - \frac{\vec{E}_0 \vec{E}_0^*}{f(\omega)} \frac{\partial^2 \vec{E}_0}{\partial x^2} \\ \frac{\partial^2 \vec{E}_2}{\partial x^2} + \alpha^2 p^2 \vec{E}_2 = b_1 \vec{E}_1 + b_2 \vec{E}_0 - \frac{\vec{E}_0 \vec{E}_0^*}{f(\omega)} \frac{\partial^2 \vec{E}_1}{\partial x^2} - \frac{\vec{E}_0 \vec{E}_1^* + \vec{E}_0^* \vec{E}_1}{f(\omega)} \frac{\partial^2 \vec{E}_0}{\partial x^2} \\ \frac{\partial^2 \vec{E}_3}{\partial x^2} + p^2 \vec{E}_3 = b_1 \vec{E}_2 + b_2 \vec{E}_1 + b_3 \vec{E}_0 - \\ - \frac{\vec{E}_0 \vec{E}_0^*}{f(\omega)} \frac{\partial^2 \vec{E}_2}{\partial x^2} - \frac{\vec{E}_0 \vec{E}_1^* + \vec{E}_0^* \vec{E}_1}{f(\omega)} \frac{\partial^2 \vec{E}_1}{\partial x^2} - \frac{\vec{E}_1 \vec{E}_1^* + \vec{E}_0 \vec{E}_2^* + \vec{E}_0^* \vec{E}_2}{f(\omega)} \frac{\partial^2 \vec{E}_0}{\partial x^2} \\ \dots \end{array} \right. \quad (4)$$

Константы b_j следует определять, каждый раз запрещая резонанс решения из правой части неоднородных уравнений.

При наличии границ раздела сред, необходимо аналогичным образом раскладывать по степеням α все граничные условия и аккуратно сопоставлять друг с другом все решения с соответствующими степенями малости для линейных и нелинейных граничащих сред. Такой подход требует обязательной проверки получаемых решений на сходимость и оценки границ применимости выбранного ограничения старшей степени α оборванного ряда.

Предложенный подход позволяет последовательно найти решения ряда традиционных краевых задач с учетом нелинейного характера дисперсии среды и относительно доступно их анализировать.

ЛИТЕРАТУРА

1. М.И. Бать. «Теоретическая механика в примерах и задачах» М.: Наука, 1973.
2. Л.Г. Лойцянский «Курс теоретической механики» М.: Наука, 1983.
3. А. В.В. Гримальский и др. // Известия Вузов. Радиоэлектроника 2015. Т. 58. № 9. С. 33-40.
4. С.В. Федоров и др. // ЖТФ, 1999. Т. 69. Вып. 4. С. 116-117.
5. П.В. Дзюба // Письма в ЖТФ, 2010, Том 36, Вып. 21. С. 1-9.
6. Вендик О.Г. Сегнетоэлектрики в технике СВЧ. М.: Советское радио, 1979.

Численное решение двумерной задачи с подвижной границей для моделирования активного движения клетки.

В.В. Черник¹, П.О. Буклемишев²

¹Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского РАН (Москва, Россия)

²МГУ имени М.В. Ломоносова (Москва, Россия)

gungho424@gmail.com

Механизм подвижности живых клеток является предметом исследования для широкого круга ученых [1]. В работе представлена простая двумерная модель клетки со свободными границами, движущейся по однородной и изотропной поверхности [2]. Описывается динамика сложной актомиозиновой жидкости, свойства которой влияют на динамику границ и подвижность клетки. Закон Дарси описывает поток актомиозиновой жидкости, а распределение миозина в клетке изменяется в соответствии с уравнением адвекции диффузии в области $\Omega(t)$ (0.1-2). Смешанные граничные условия Юнга-Лапласа содержат нелокальный член, отвечающий за растяжение и сжатие цитоскелета клетки и отклонение от гомеостатического давления (0.3). Также на границе $\partial\Omega(t)$ присутствуют условия непрерывности нормальной составляющей скорости жидкости на границе и условие непротекания для миозина (0.4-5).

$$\Delta\varphi = \zeta\varphi - Q(m) \quad \text{в } \Omega(t) \quad (0.1)$$

$$m_t = \Delta m - \nabla \cdot (m \nabla \varphi) \quad \text{в } \Omega(t) \quad (0.2)$$

$$\zeta\varphi = -\gamma\kappa + p_{\text{eff}} \left(\left| \Omega(t) \right| \right) \quad \text{на } \partial\Omega(t) \quad (0.3)$$

$$V_\nu = \partial_\nu \varphi \quad \text{на } \partial\Omega(t) \quad (0.4)$$

$$\partial_\nu m = 0 \quad \text{на } \partial\Omega(t) \quad (0.5)$$

Для получения приближенного решения задача была сведена к краевой задаче [3] со смешанными условиями на постоянной границе, разработана специальная разностная схема второго порядка точности [4] и реализована в виде программного модуля на языке Python. Получены устойчивые решения, в том числе решения типа бегущей волны [2] сходящиеся к некоторым аналитическим со вторым порядком точности (см. Рис).

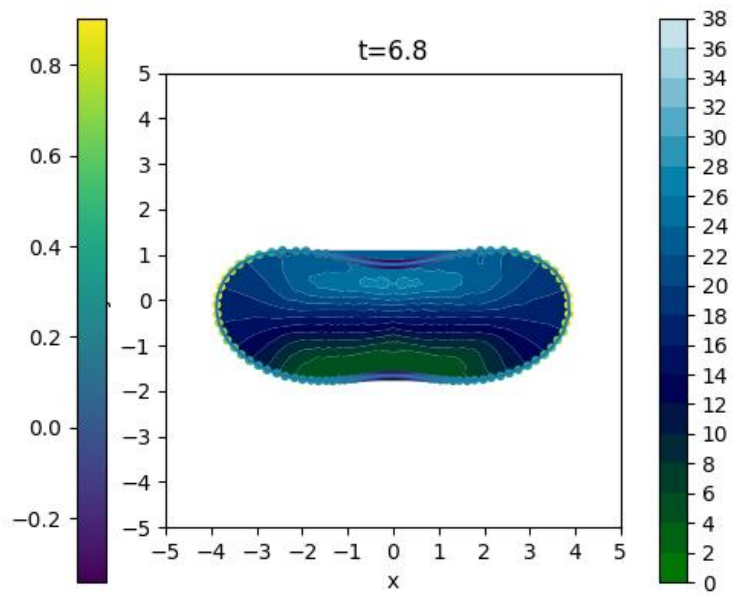


Рис. Пример визуализации подвижной клетки

ЛИТЕРАТУРА

1. A. Mogilner // J Math Biol. 2009. V. 58. Iss. 1
2. C.A.Safsten, V. Rybalko, L.Berlyand // Phys Rev E. 2022. V. 105. Iss. 2.
3. А. А. Самарский, П. Н. Вабищевич // М.: Едиториал УРСС, 2003.
4. А. Н. Тихонов, А. А. Самарский // Ж. вычисл. матем. и матем. физ., 1962, том 2, №5.

Оптимизация разложения в конечный ряд Фурье однонаправленного широкоугольного пропагатора

Е.О. Коннова¹, П.В. Юлдашев¹, В.А. Хохлова¹

¹Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, физический факультет
helen.7aprel@gmail.com

В настоящее время методы высокоинтенсивного сфокусированного ультразвука активно развиваются в медицинских целях, например, для неинвазивного разрушения опухолей в мягких тканях организма. Численное моделирование сфокусированных пучков играет решающую роль при проектировании преобразователей и прогнозировании характеристик ультразвукового поля, создаваемого ими. Для построения наиболее точных теоретических моделей для моделирования ультразвука обычно используются полноволновые уравнения акустики, которые, однако, при их численном решении требуют больших вычислительных ресурсов. Однонаправленные волновые модели, основанные, например, на однонаправленном уравнении Вестервельта или уравнении Хохлова-Заболотской-Кузнецова (ХЗК), предпочтительны с точки зрения вычислительных затрат во многих случаях, особенно когда нелинейные эффекты играют существенную роль. Численные алгоритмы для однонаправленного уравнения Вестервельта в основном адаптированы для однородных или слоистых сред. Также разработаны численные методы решения параболического уравнения, как в однородных, так и в плавно неоднородных средах. Однако из-за параксиального приближения их использование ограничено слабо сфокусированными пучками, тогда как сфокусированные ультразвуковые преобразователи часто имеют большие углы фокусировки.

В этих условиях имеет смысл обратиться к более общим широкоугольным параболическим приближениям для описания дифракции однонаправленных пучков, которые также могут охватывать случаи слабо неоднородных сред распространения [1]. Для построения такой модели сначала обычно записывают однонаправленное псевдодифференциальное волновое уравнение:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial z} = ik_0 \left(\sqrt{1 + \hat{L}} - 1 \right) \varphi, \quad (1)$$

где φ – медленно изменяющаяся амплитуда давления, k_0 – волновое число, z – выделенная координата преимущественного распространения волн, $\hat{L} = \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) / k_0^2 = \hat{L}_x + \hat{L}_y$ – оператор Лапласа по поперечным к оси z координатам, $\sqrt{1 + \hat{L}}$ – псевдодифференциальный оператор. Формальное решение однонаправленного уравнения записывается в виде $\varphi(z + \Delta z) = \hat{H} \varphi(z)$, где оператор \hat{H} называется однонаправленным пропагатором, который действует на поле давления на расстоянии z для генерации поля на расстоянии $z + \Delta z$. Пропагатор записывается в виде формулы:

$$\hat{H} = \exp[ik_0 \Delta z (\sqrt{1 + \hat{L}} - 1)]. \quad (2)$$

Обычно при построении широкоугольной модели распространения к оператору однонаправленного пропагатора применяется метод аппроксимаций Паде, который часто упоминается в литературе как метод «сплит-степ Паде» [2-3]. Такой подход приводит к необходимости решения уравнений следующего типа:

$$(1 + \nu \hat{L})\varphi = f, \quad (3)$$

где ν – комплексный коэффициент, а функция f в правой части уравнения известна.

В случае решения двумерных задач с выделенным направлением распространения и одной поперечной координатой результирующие уравнения могут быть эффективно решены численными методами конечных разностей, поскольку матрицы линейных систем часто являются трехдиагональными. Однако в трехмерной формулировке результирующие системы линейных уравнений с большими блочными разреженными матрицами данных требуют существенных вычислительных затрат. Чтобы обойти эту проблему, было предложено разложить пропагатор в конечный ряд Фурье в заданном диапазоне значений ξ – собственных значений оператора \hat{L} [4]:

$$H(ik_0 \Delta z, \xi) = \exp[ik_0 \Delta z(\sqrt{1 + \xi} - 1)] \approx \sum_{n=-N}^N A_n \exp(B_n \xi), \quad (4)$$

где A_n – амплитудные коэффициенты, B_n – дискретные частоты, N – число гармоник.

Таким образом, в этом методе расчета волнового поля на каждом следующем шаге вдоль оси z вычисления сводятся к оценке действия ряда экспоненциальных пропагаторов на волновое поле на текущем шаге. Эти экспоненциальные пропагаторы аналогичны по структуре пропагатору стандартного параболического уравнения. Ценность такого представления широкоугольного пропагатора состоит в том, что становится возможным применить схемы расщепления для операторов, действующих вдоль оси x и y . Тогда при построении конечно-разностных схем расчеты могут выполняться путем решения системы линейных уравнений с трехдиагональными матрицами. Недостаток данного подхода состоит в том, что хотя большее число членов в разложении в ряд Фурье повышает точность аппроксимации, но также возрастает и сложность вычислений пропорционально числу гармоник N .

Целью данной работы была оптимизация числа коэффициентов гармоник Фурье, чтобы уменьшить количество членов в разложении (4), необходимых для аппроксимации пропагатора без потери точности. Было показано, что для достижения погрешности аппроксимации пропагатора порядка 0,0000001 для широкоугольной модели описания пучка с углом фокусировки шестьдесят градусов требуется не более 100 гармоник Фурье.

Работа выполнена при поддержке гранта Российского научного фонда № 23-22-00220 и студенческой стипендии фонда "Базис" №22-2-2-35-1.

ЛИТЕРАТУРА

1. D. Lee, A. D. Pierce, E.-C. Shang // J. Comp. Acoust., V. 08, No 04, P. 527–637, 2000.
2. M. Collins // J. Acoust. Soc. Am., V. 93, No 4, P. 1736–1742, 1993.
3. D.J. Thomson, N.R. Chapman // J. Acoust. Soc. Am. V. 74, No 6, P. 1848-1854, 1983.
4. Юлдашев П.В., Коннова Е.О., Хохлова В.А. // Труды XXXV Сессии Российского акустического общества, ГЕОС Москва, с. 521, 2023.

Формирование бегущего биона уравнения Гинзбурга-Ландау-Хиггса в процессе столкновения кинков

Д.В. Завьялов¹, В.И. Конченков^{1,2}, С.В. Крючков^{1,2}, Сивашова Е.С.¹

¹Волгоградский государственный технический университет

²Волгоградский государственный социально-педагогический университет
sinegordon@gmail.com

Уравнение вида

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} - \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + F(\varphi) = 0, \quad (1)$$

где $F(\varphi)$ - нечетная функция, встречается в различных разделах теоретической и математической физики. В частности, в работе [1] исследуется приближенное решение в виде бегущего бризера уравнения Клейна-Гордона в пределе малых амплитуд ($\varphi \ll 1$):

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} - \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \varphi - \beta \varphi^3 = 0. \quad (2)$$

Другой формой записи уравнения (1) в пределе малых амплитуд является уравнение Гинзбурга-Ландау-Хиггса:

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} - \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} - m^2 \varphi + \lambda \varphi^3 = 0. \quad (3)$$

Уравнение (3) имеет кинковые решения вида

$$\varphi = \mp \frac{m}{\sqrt{\lambda}} \tanh \left(m(x - x_0 - Vt) \left(2(1 - V^2) \right)^{-1/2} \right), \quad (4)$$

где V - скорость кинка в единицах скорости света, x_0 - начальная координата центра кинка.

В отличие от уравнения sineGordon, которое имеет двухпараметрическое осциллирующее решение, называемое бризером, уравнение (3) таких решений не имеет. Однако в [2] доказано, что уравнение (3) имеет подобное бризеру долгоживущее приближенное решение малой амплитуды, названное бионом. В [3] численным интегрированием уравнения (3) найдены бионы большой амплитуды. Начальные условия были выбраны в виде движущихся навстречу друг другу кинков типа (4) с одинаковой скоростью.

В [2-4], а также еще в ряде работ [5, 6] речь шла о локализованных в пространстве решениях, центр тяжести которых находится на месте. Насколько нам известно, возможность образования бионов (произвольной амплитуды), движущихся в пространстве, еще не исследована, хотя этот вопрос представляет, по крайней мере, теоретический интерес. В [1] разработан аналитический метод нахождения таких долгоживущих решений малой амплитуды уравнения (2), однако до сих пор не исследован вопрос формирования таких решений.

Цель настоящей работы - показать возможность образования бионов малой амплитуды в системах, описываемых уравнением (3). Основная идея образования движущихся бионов – столкнуть кинки с разной скоростью.

Численно решалось уравнение (3) с начальными условиями, соответствующими кинку и антикинку, движущимися в одном направлении с разными скоростями, так что быстрый догоняет медленный.

Выяснилось, что в зависимости от соотношения скоростей возможна ситуация, в которой при слиянии кинк-антикинк-пары образуется движущееся долгоживущее решение типа биона. Профиль такого решения показан на рис. 1 и 2.

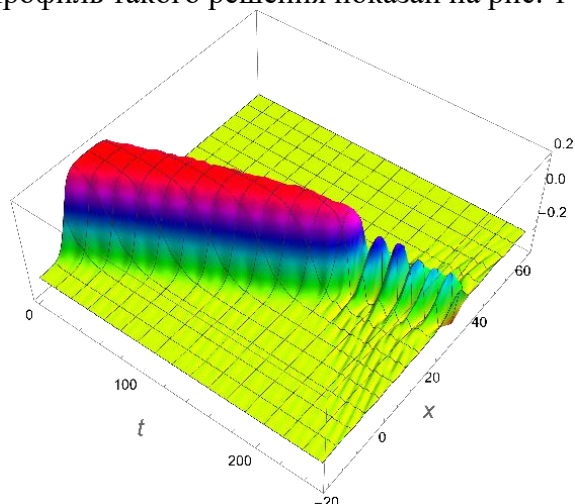


Рис. 1. Профиль решения $\varphi(x, t)$ при $V_1 = 0.1$, $V_2 = 0.15$

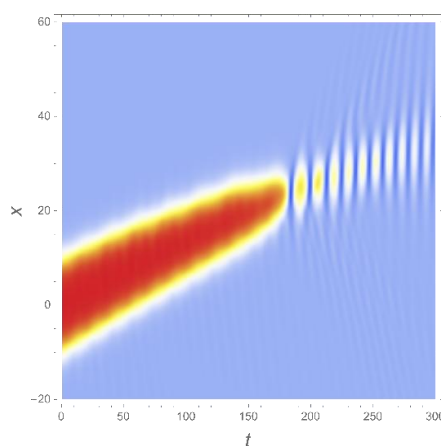


Рис. 2. Карта плотности решения $\varphi(x, t)$ при $V_1 = 0.1$, $V_2 = 0.15$

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства просвещения Российской Федерации в рамках государственного задания. Название проекта «Распространение и взаимодействие уединенных волн в наноструктурах на основе дираковских материалов».

ЛИТЕРАТУРА

1. Д.В. Завьялов, В.И. Конченков, С.В. Крючков // ЖТФ. 2022. Т. 92. Вып. 12. С. 1763.
2. А.М. Косевич, А.С. Ковалев // ЖЭТФ. 1974. Т. 67. С. 1793.
3. А.Е. Кудрявцев // Письма в ЖЭТФ. 1975. Т. 22. Вып. 3. С. 178.
4. Е.С. Седов и др. // Письма в ЖЭТФ. 2016. Т. 104. Вып. 1. С. 58.
5. F. Martin-Vergara, F.Rus, F.V. Villatoro // Chaos, Solitons and Fractals. 2022. V. 162. 112530.
6. L.A. Ferreira, W.J. Zakrzewski // Nonlinearity. 2016. V. 29. Num. 5. P. 1622.

Скорости химических реакций в базе данных ТЕФИС по теплофизическим свойствам плотной плазмы

О.И. Топор¹, А.А. Белов^{1,2}, Л.В. Бородачев¹

¹МГУ им. М.В. Ломоносова

²РУДН

topor.oi15@physics.msu.ru aa.belov@physics.msu.ru borodach2000@mail.ru

Проблема. Для решения широкого спектра практических проблем, включающих моделирование химических реакций, требуется знать зависимости скоростей химических реакций $K(T)$ от температуры. Примерами таких задач являются (1) Горение водорода в кислороде, что является очень перспективным в свете проектов ракетных двигателей для космических полетов к ближним планетам. У них намного больше удельная тяга, чем у используемых сейчас двигателей на керосине и жидком кислороде; (2) Расчет химических реакций при вхождении спускаемых космических аппаратов в атмосферу. Это существенно для аэродинамической устойчивости спускаемых аппаратов типа шаттл; (3) Расчет эволюции в атмосфере водорода, испускаемого из земных глубин. По ряду данных, это влияет на формирование не только погоды, но и озоновых дыр и, в частности, ответственно за формирование арктической полыньи между границей Сибири и паковых льдов; (4) Задачи экологии: влияние сернистых, галогеновых и др. выбросов на атмосферу, образование загрязняющих оксидов и др.

Экспериментальные данные. Наиболее надежным источником данных по скоростям химических реакций являются эксперименты. В химических экспериментах непосредственно измеряют концентрации реагирующих веществ в зависимости от времени. Затем по профилям концентраций получают значение скорости реакции $K(T)$ при фиксированных температурах и давлениях.

Как правило, по каждой реакции имеется много экспериментальных работ различных авторов, причем диапазон условий в них частично перекрывается, частично различается. Обычно каждый автор производит обработку своих измерений, используя аппроксимирующую формулу обобщенного аррениусовского типа

$$K(T) = AT^n \exp(-E/T) \quad (1)$$

Здесь A , n , E – подгоночные параметры. Из-за неизбежных погрешностей эксперимента результаты различных авторов отличаются друг от друга, причем нередко значительно.

Чтобы нивелировать индивидуальные отклонения отдельных экспериментов, применяют совместные обработки данных из большого количества разных источников (см., например, [1,2]). Однако в таких обработках остается неясным, с какой точностью получаются коэффициенты обобщенной формулы Аррениуса. Коэффициенты, даваемые разными коллективами, могут отличаться. В этих работах иногда делаются экспертные оценки точности полученных коэффициентов и коридоров достоверности полученных кривых, однако аккуратный статистический анализ отсутствует.

База данных. С 1960-х годов в Институте прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН коллектив под руководством Калиткина создает базу данных ТЕФИС по теплофизическим свойствам веществ. В последние годы в эту базу включен раздел, посвященный скоростям химических реакций, описывающих ряд актуальных процессов. В данной работе представлено текущее состояние работ по этому направлению.

Для создания этого раздела были разработаны новые математические методы регрессии экспериментальных данных, измеренных со значительными погрешностями

[3]. Для аппроксимации мы используем полиномы, ортогонализированные на множестве экспериментальных точек с весами, равными обратным квадратам погрешностей. Благодаря ортогональности базиса погрешности коэффициентов аппроксимации являются некоррелированными. Это позволяет построить статистически достоверные оценки погрешности коэффициентов и аппроксимирующей кривой. Сами коэффициенты можно округлять независимо в пределах соответствующих погрешностей. Напомним, что при разложении по неортогональным полиномам коэффициенты разложения оказываются коррелированными, и их независимое округление может вносить заметную погрешность. Показано, что построенные оценки доверительных интервалов значительно точнее, чем классические оценки, основанные на распределении Стьюдента.

В качестве примера приведем обработку экспериментальных данных для реакции $N_2O + M \rightarrow N_2 + O + M$. По ней в базе данных NIST [1] приведены ссылки на 18 оригинальных работ, содержащих в общей сложности ~640 точек. Полученная аппроксимирующая прямая, а также границы ее доверительного коридора представлены на рис. 1.

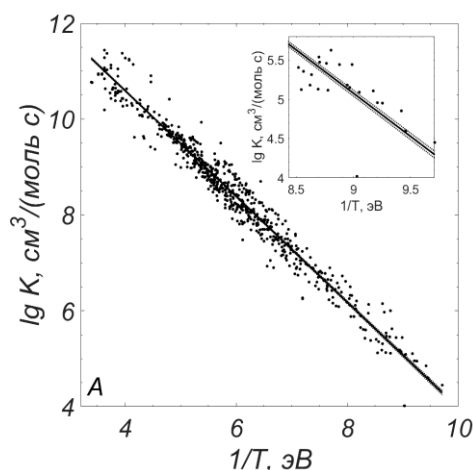


Рис. 1. Реакция $N_2O + M \rightarrow N_2 + O + M$. Точки – эксперименты. Сплошная линия – аппроксимация ТЕФИС, пунктир – границы ее доверительного интервала.

Описанный метод был применен пяти системам реакций: (1) 20 реакций водородо-воздушного горения, существенных для задач плазмохимии ($T < 1000$ К, $p \sim 1$ атм); (2) 15 реакций термического разложения этана [7], (3) 10 реакций водород-кислородного горения, существенных в условиях сопла реактивного двигателя ($T \sim 3000$ К, $p \sim 150$ атм); (4) 16 реакций с участием S, H, O, N, существенных в условиях нижних слоев атмосферы ($T \sim 300$ К, $p \sim 1$ атм). (5) порядка 100 реакций с участием галогенов F, Cl, Br, I, H, O, N также существенных в условиях нижних слоев атмосферы ($T \sim 300$ К, $p \sim 1$ атм). Полученная точность аппроксимации составляет 1-10% для хорошо изученных реакций и 20-30% для плохо изученных. Это в 3-5 раз точнее мирового уровня.

ЛИТЕРАТУРА

- [1]. NIST Chemical kinetics database. Standard reference database 17-2Q98.
<http://kinetics.nist.gov/kinetics/>
- [2]. Berkeley University, Gas Research Institute, GRI-Mech 3.0.
http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/.
- [3]. Белов А.А., Калиткин Н.Н. // ЖВМиМФ. 60:7 (2020), 105-113.

Построение сингулярной части электромагнитного поля в окрестности ребра цилиндра с произвольной формой сечения для различных типов граничных условий

М.М. Шушарин, И.Е. Могилевский, А.Н. Боголюбов

Кафедра математики физического факультета МГУ им. М.В. Ломоносова

nirashush1999@gmail.com

При моделировании электромагнитного поля внутри безэховых камер и волноведущих систем со сложной формой поперечного сечения, зачастую приходится сталкиваться с краевыми задачами в областях, имеющих рёбра на границе. Как известно, наличие ребер или других особых точек на границе может приводить к возникновению сингулярности у электромагнитного поля в их окрестности [1]. Это, в свою очередь, понижает точность численных методов. Чтобы их модифицировать и повысить сходимость необходимо провести теоретическое исследование особенности решения в окрестности ребра границы.

В работе поводится теоретическое исследование особенности электромагнитного поля в области в виде бесконечного цилиндра, граница которого в цилиндрической системе координат задаётся уравнением $\varphi = \varphi_{1,2}(r)$, где нижний индекс соответствует номеру одной из граней (В качестве оси z выбираем ребро). Показано, что как для внутренней, так и для внешней задачи, сингулярная часть решения имеет одинаковый вид. Проведя преобразование Фурье вдоль ребра, можно свести задачу к двумерной. На боковых границах цилиндра рассматриваются три вида условий: условия идеальной проводимости, импедансные условия и условия сопряжения. Используется метод построения асимптотического представления решения эллиптического уравнения в окрестности особой точки границы, разработанный В.А. Кондратьевым [2].

Для случаев идеально проводящего и диэлектрического цилиндра (для задачи в волноводе этот случай описывает наличие диэлектрической вставки), полное поле представимо в виде суперпозиции полей электрического и магнитного типов. Учитывая гармоническую зависимость поля от времени, исследуемую задачу можно свести к двум двумерным краевым задачам для уравнения Гельмгольца. Для задачи дифракции на бесконечности для дифрагированного поля справедливы условия Зоммерфельда. На границе для случая идеального проводника, поле электрического типа удовлетворяет условиям Дирихле, поле магнитного типа — условиям Неймана. В случае диэлектрика для обеих поляризаций справедливы условия сопряжения одинакового вида.

В случае граничных условий Шукина-Леонтовича, решаемую задачу нельзя разбить на две отдельные задачи для двух поляризаций. Тем не менее, после некоторых преобразований, решаемую задачу можно свести к двумерной, и применять используемый в работе метод аналогично случаям диэлектрика и идеального проводника.

Для исследования сингулярной части электромагнитного поля введём семейство нормированных функциональных пространств $V_Y^l(\Omega)$ (Ω — исследуемая область), впервые представленное в работах В.А. Кондратьева [2], нормы которых определяются формой:

$$\|E\|_{V_Y^l(\Omega)}^2 = \sum_{j+k \leq l} \iint_{\Omega} r^{2(\gamma-1+j)} \left| \frac{\partial^{j+k} E}{\partial r^j \partial \varphi^k} \right|^2 r \, dr \, d\varphi < \infty.$$

Через условие ограниченности нормы соответствующего пространства проводятся оценки гладкости решения в окрестности нуля. Метод, используемый в работе, был изначально разработан для эллиптических дифференциальных уравнений в областях с

конической особой точкой на границе. В настоящей работе он применяется для случая двумерной конической точки, то есть угловой точки.

Рассмотрим сперва случай бесконечного сектора в сечении цилиндра. Сделаем замену радиальной переменной $\tau = \ln \frac{1}{r}$. Так задача в бесконечном секторе сводится к задаче в бесконечной полосе. Сделав преобразование Фурье по переменной τ вдоль полосы, сводим исходную задачу к одномерной краевой задаче с параметром. Решая эту задачу при помощи разложения в ряд по собственным функциям соответствующей задачи Штурма-Лиувилля, можно убедиться, что Фурье-образ решения имеет полюсы на комплексной плоскости. Из условия Мейкснера на ребре можно сделать начальную оценку для решения, исходя из которой можно заключить, что интеграл, соответствующий обратному преобразованию Фурье сходится вдоль прямой на комплексной плоскости, параллельной действительной оси, сдвинутой относительно неё на высоту, зависящую от начальной оценки на правую часть, и определяет функцию, более гладкую, чем решение. Фурье-образ решения является мероморфной функцией в полосе между действительной осью и этой прямой. Следовательно, по основной теореме о вычетах, при проведении обратного преобразования Фурье можно переходить от интегрирования по нижней границы полосы к интегрированию по верхней, а особенность решения будет передаваться вычетами в полюсах, лежащих между этими прямыми. При этом, особенность решения, например для случая идеальной проводимости будет иметь следующий вид:

$$E_z(r, \varphi) = \sum_{0 < \frac{\pi n}{\alpha} < 2} C_n r^{\frac{\pi n}{\alpha}} \sin \frac{\pi n \varphi}{\alpha} + R_E(r, \varphi),$$

$$H_z(r, \varphi) = \sum_{0 < \frac{\pi n}{\alpha} < 2} C_n r^{\frac{\pi n}{\alpha}} \cos \frac{\pi n \varphi}{\alpha} + R_H(r, \varphi),$$

где α - угол раствора сектора, первое слагаемое – сингулярная часть решения, а вторая – гладкая часть, для которой сделана оценка через норму соответствующего функционального пространства. В случае задачи для диэлектрика в показателе степени над радиальной координатой будут стоять собственные значения задачи Штурма-Лиувилля с условиями сопряжения. В случае граничных условий Щукина-Леонтовича можно получить тот же результат, что и для задачи Неймана. Однако, из-за некоторых вспомогательных преобразований, оценка для гладкой части решения станет слабее, а в сингулярной части будет выделено меньше слагаемых.

Свести задачу в области более общего вида, описанной выше, к задаче в секторе, можно заменой переменных. Показано, что при выполнении дополнительных условий на границу вблизи ребра, асимптотическое представление решения в новых координатах имеет тот же вид, что и в старых.

Полученное представление решения может быть использовано для повышения сходимости численных методов при математическом моделировании безэховой камеры. Поскольку сингулярная часть поля благодаря полученному представлению аппроксимируется точно, проблема сводится к аппроксимации гладкой части.

ЛИТЕРАТУРА

1. А.Г. Свешников, И.Е. Могилевский, Избранные математические задачи теории дифракции, Физический Факультет МГУ им. М.В. Ломоносова, 2012.

2. В.А. Кондратьев, Краевые задачи для эллиптических уравнений в областях с коническими или угловыми точками, Труды Московского Математического Общества, т.16, 1967, с. 227-313.

Прецизионный расчет одномерных квадратур

М.А. Тинтул^{*}, В.С. Хохлачев^{**}, А.А. Белов
119991 Москва, Ленинские горы, МГУ, физ. фак-т, Россия

^{*}email: maksim.tintul@mail.ru

^{**}email: valentin.mycroft@yandex.ru

Проблема. Во многих прикладных задачах требуется экономичное вычисление квадратур

$$I = \int_0^1 f(x) dx \quad (1)$$

с высокой точностью. Примерами являются вычисление многих специальных функций, разложение заданной функции в ряд или интеграл Фурье, вычисление различных интегральных преобразований, решение интегральных уравнений, решение краевых задач для уравнений математической физики, записанных в интегральной форме, и многие другие.

В литературе описано большое количество методов вычисления таких квадратур. Наиболее употребительны формулы трапеций, средних и Симпсона на равномерных или неравномерных сетках, квадратуры Гаусса-Кристоффеля и Гауссово-сеточный метод [1]. Для улучшения сходимости применяют различные замены переменных интегрирования, а также используют поправки Эйлера-Маклорена.

Из такого многообразия методов прикладнику необходимо выбрать тот, от которого можно ожидать наилучшую точность в конкретной задаче. Еще более желательной была бы возможность применять единообразную стратегию расчета для широкого круга задач.

В данной работе отобраны лучшие квадратурные формулы и проведено их количественное сравнение на ряде представительных примеров.

Квадратуры. Пусть подынтегральная функция является бесконечно гладкой внутри отрезка интегрирования и непериодической.

Общеизвестные квадратуры трапеций, средних и Симпсона имеют степенную скорость сходимости. Погрешность зависит от шага h сетки как $O(h^m)$. Экстраполяционное уточнение по Ричардсону и уточнение по формулам Эйлера-Маклорена повышают порядок точности m , однако закон сходимости остается степенным. Такая сходимость довольно медленна.

Кардинально точнее методы, имеющие сверхстепенную либо экспоненциальную сходимость. Их погрешность зависит от шага сетки по закону, близкому к $\sim \exp(-1/h)$. Это означает, что при уменьшении шага вдвое число верных знаков в ответе примерно удваивается. Такую скорость сходимости реализуют квадратура Гаусса-Кристоффеля, Гауссово-сеточный метод и формула средних после специальной замены переменных.

Квадратуры Гаусса-Кристоффеля сталкиваются с двумя трудностями. Во-первых, нахождение узлов и весов этих квадратур представляет отдельную проблему. Эти узлы и веса найдены только для отдельных частных случаев. Во-вторых, в оценку погрешности квадратуры, содержащей N узлов, входит производная подынтегральной функции порядка $2N$. Поэтому для реализации экспоненциальной сходимости необходимо, чтобы все производные были ограничены на отрезке интегрирования.

На практике более удобен Гауссово-сеточный метод. Он состоит в том, что отрезок интегрирования разбивается на шаги длины h , для каждого из которых записывается квадратура Гаусса с небольшим числом узлов $N=2-5$. Этот метод

предъявляет такие же требования к гладкости функции, как классическая квадратура Гаусса.

Замены переменных. Согласно формуле Эйлера-Маклорена, степенная часть погрешности квадратуры средних и трапеций содержит слагаемые вида $h^{2m}(f^{(2m-1)}(1) - f^{(2m-1)}(0))$. В литературе описаны [2-5] замены переменных, после которых подынтегральная функция допускает периодическое продолжение, т.е. $f^{(2m-1)}(1) = f^{(2m-1)}(0) = 0$. В результате степенные по h слагаемые в остаточном члене обращаются в нуль, и сходимость становится сверхстепенной. Отметим, что такой закон сходимости реализуется независимо от поведения $f(x)$ вблизи концов отрезка (a, b) : она может иметь неограниченную производную и даже обращаться в бесконечность (несобственный интеграл).

Хорошие результаты дает двухэтапная замена переменных. Сначала с помощью замены

$$x = (1 - (1 - \tilde{x})^v)^v \quad (2)$$

исключают разрыв подынтегральной функции, а также ее первой и второй производных на концах отрезка. Затем с помощью замены

$$t(\xi) = \frac{(\xi - 0.5)}{\xi(1 - \xi)}, \quad x(t) = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \text{th}(t), \quad (3)$$

обеспечивают реализацию сверхстепенной сходимости. Насколько нам известно, такая двухэтапная замена является новой.

Подынтегральная функция может иметь особые точки (нарушение гладкости, обращение подынтегральной функции или ее производных в бесконечность) внутри отрезка интегрирования. Тогда в каждую особую точку нужно поместить узел, на полученных промежуточных отрезках ввести равномерные сетки и применить к этим отрезкам замены (2), (3).

Сравнение квадратур. Таким образом, к лучшим можно отнести Гауссово-сеточный метод и квадратуры трапеций и средних с заменой (2), (3). При этом последние реализуют сверхстепенную сходимость для существенно более широкого класса подынтегральных функций.

По количественной точности заранее неясно, какой из методов даст преимущество. Так, если подынтегральная функция «достаточно плавная», т.е. ее производные $\|f^{(N)}\|$ медленно возрастают с ростом N , то можно ожидать, что Гауссово-сеточный метод окажется более точным. В то же время нетрудно построить примеры, в которых он уступает по точности формуле трапеций с заменой (2), (3). Одним из таких примеров является

$$I = 2 \int_0^1 (8x + 1)^{-1} dx. \quad (4)$$

Погрешности расчета этого интеграла разными способами приведены на рис. 1. Здесь светлые кружки – формула средних с заменой (3), темные кружки – формула средних с заменой (2), (3), треугольники – Гауссово-сеточный метод с $N = 5$. Видно, что Гауссово-сеточный метод дает примерно такую же точность, что и формула средних с заменой (3). Формула средних с заменой (2), (3) кардинально превосходит по точности два других метода.

Таким образом, формулы трапеций и средних с заменой (2), (3) представляются наиболее простым и универсальным средством вычисления одномерных интегралов (1). В ряде случаев они могут уступать по точности Гауссово-сеточному методу. Однако они реализуют сверхстепенную сходимость для значительно более широкого круга задач. Поэтому их можно смело рекомендовать для практических вычислений.

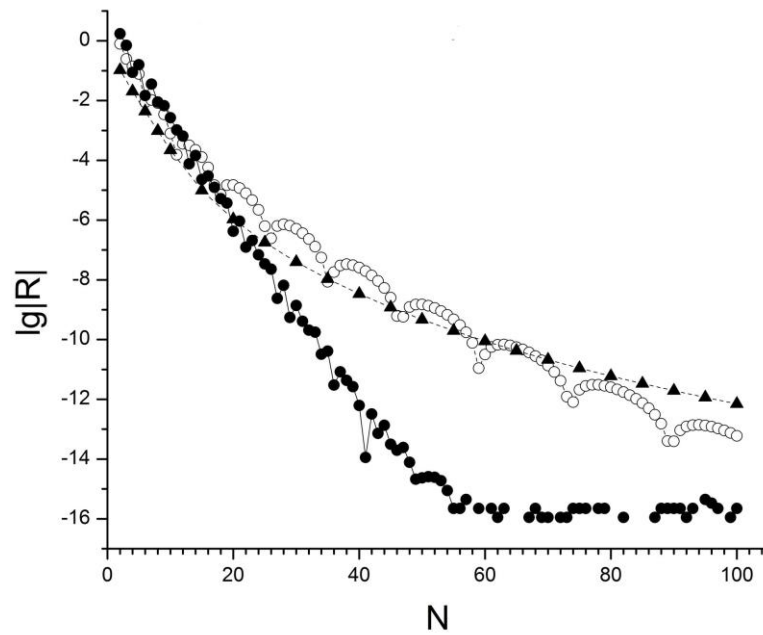


Рис. 1. Погрешности в тесте (4). Обозначения – см. текст.

ЛИТЕРАТУРА

1. Н.Н. Калиткин, Е.А. Альшина “Численные методы. Том. 1. Численный анализ” М.: Академия, 2013.
2. A. Sidi // International Series of Numerical Mathematics. E. 1993. V. 112. P. 359.
3. Sag T.W., Szekeres G. // Math. Comp. 18 (1964). P. 245.
4. Iri M. et al.// J. Comp. Appl. Math., 17 (1987), P. 3.
5. Тинтул М.А., Хохлачев В.С., Белов А.А. // Изв. РАН. Сер. физ. 86:11 (2022). 1621.