

ИПМ им. М. В. Келдыша РАН
(Москва)

ВСЕРОССИЙСКАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ

«ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ КОНСТРУИРОВАНИЯ
ЧИСЛЕННЫХ АЛГОРИТМОВ И РЕШЕНИЕ ЗАДАЧ
МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ»,
посвященная памяти К. И. Бабенко

24–26 августа 2022 г.

Пушино, Московская область

ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

Москва – 2022

УДК 51, 53

ББК 22.19

Тезисы докладов Всероссийской научной конференции «Теоретические основы конструирования численных алгоритмов и решение задач математической физики», посвященной памяти К. И. Бабенко (Пушино, 24–26 августа, 2022). – М.: ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, 2022. – 120 с.

АННОТАЦИЯ

Основное направление работы конференции - это новейшие достижения в различных аспектах аналитических и численных методов решения актуальных фундаментальных и прикладных задач математической физики и биологии, гидро- и газовой динамики и смежных областей механики сплошных сред (с особым вниманием к распараллеливанию вычислений), в вычислительных задачах теорий функций и обработки больших данных.

ОРГАНИЗАТОРЫ КОНФЕРЕНЦИИ



Федеральное государственное
учреждение «Федеральный
исследовательский центр
Институт прикладной математики
им. М.В. Келдыша РАН»



Московский центр
фундаментальной и прикладной
математики

Редакционный комитет: А.Л. Афендилов, В.Т. Жуков, Т.В. Константиновская, Т.В. Дудникова, А.А. Таюрский

Москва, 2022

=====

©ИПМ им. М.В. Келдыша РАН

Keldysh Institute of Applied Mathematics RAS
(Moscow, Russia)

ALL-RUSSIAN CONFERENCE

«SCIENTIFIC THEORY OF THE NUMERICAL
ALGORITHMS CONSTRUCTION AND THE
SOLUTION OF THE MATHEMATICAL PHYSICS
PROBLEMS»,

dedicated to the memory of K. I. Babenko

24–26 August 2022

Pushchino, Moscow Region

PROCEEDINGS

Moscow – 2022

УДК 51, 53

ББК 22.19

Proceedings of the All-Russian Conference «Scientific theory of the numerical algorithms construction and the solution of the mathematical physics problems», dedicated to the memory of K. I. Babenko (Pushchino, 24–26 August, 2022), Keldysh Institute of Applied Mathematics RAS, 2022. – 120 p.

ABSTRACT

The main focus of the conference is the latest achievements in various aspects of analytical and numerical methods for solving actual fundamental and applied problems of mathematical physics and biology, hydro- and gas dynamics and related fields of continuum mechanics (with special attention to parallelization of numerical simulations), in computational problems of function theories and big data processing.

CONFERENCE ORGANIZERS



Keldysh Institute of Applied
Mathematics Russian Academy of
Sciences



Moscow Center of
Fundamental and Applied
Mathematics

Editorial committee: A.L. Afendikov, V.T. Zhukov,
T.V. Konstantinovskaya, T.V. Dudnikova, A.A. Taiurskii

Moscow, 2022

=====

©ИПМ им. М.В. Келдыша РАН

ПРОГРАММНЫЙ И ОРГАНИЗАЦИОННЫЙ КОМИТЕТЫ

Программный комитет:

А.Л. Афендииков, ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, Москва (*председатель*)
В.Т. Жуков, ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, Москва (*зам. председателя*)
Т.В. Дудникова, ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, Москва (*секретарь*)
А.И. Аптекарев, чл.-корр. РАН, ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, Москва
В.И. Бердышев, академик РАН, ИММ им. Н.Н. Красовского УрО РАН, Екатеринбург
К.В. Брушлинский, ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, Москва
Ю.Н. Дерюгин, РФЯЦ ВНИИЭФ, Саров
В.Д. Лахно, ИМПБ РАН – филиал ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, Пущино
В.А. Левин, академик РАН, Институт Механики МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва
А.Е. Луцкий, ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, Москва
Г.В. Муратова, ИММиКН, ЮФУ, Ростов-на-Дону
В.Ф. Тишкин, чл.-корр. РАН, ИПМ им. М. В. Келдыша РАН, Москва
М.Н. Устинин, ИМПБ РАН – филиал ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, Пущино
М.Ю. Филимонов, ИММ им. Н.Н. Красовского УрО РАН, Екатеринбург
Б.Н. Четверушкин, академик РАН, ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, Москва

Локальный оргкомитет:

А.Л. Афендииков, ИПМ им. М.В. Келдыша РАН (*председатель*)
В.Т. Жуков, ИПМ им. М.В. Келдыша РАН (*зам. председателя*)
А.А. Таюрский, ИПМ им. М.В. Келдыша РАН (*секретарь*)
Н.Г. Афендикова, ИПМ им. М.В. Келдыша РАН
А.А. Давыдов, ИПМ им. М.В. Келдыша РАН
Т.В. Константиновская, ИПМ им. М.В. Келдыша РАН
В.Г. Лысов, ИПМ им. М.В. Келдыша РАН
С.А. Махортых, ИМПБ РАН – филиал ИПМ им. М.В. Келдыша РАН
Н.Н. Назипова, ИМПБ РАН – филиал ИПМ им. М.В. Келдыша РАН
К.Е. Никитин, ИПМ им. М.В. Келдыша РАН
Н.Д. Новикова, ИПМ им. М.В. Келдыша РАН

А.В. Северин, ИПМ им. М.В. Келдыша РАН

М.Н. Устинин, ИМПБ РАН – филиал ИПМ им. М.В. Келдыша РАН

PROGRAM and LOCAL COMMITTEES

Program Committee:

A.L. Afendikov, KIAM RAS, Moscow (*chairman*)
 V.T. Zhukov, KIAM RAS, Moscow (*vice-chairman*)
 T.V. Dudnikova, KIAM RAS, Moscow (*secretary*)
 A.I. Aptekarev, corresponding member RAS, KIAM RAS, Moscow
 V.I. Berdyshev, academician RAS, N.N. Krasovskii IMM UB RAS, Yekaterinburg
 K.V. Brushlinsky, KIAM RAS, Moscow
 Yu.N. Deryugin, Russian Federal Nuclear Center VNIIEF, Sarov
 V.D. Lakhno, IMPB RAS – Branch of KIAM RAS, Pushchino
 V.A. Levin, academician RAS, Institute of Mechanics Lomonosov MSU, Moscow
 A.E. Lutsky, KIAM RAS, Moscow
 G.V. Muratova, Vorovich Institute of Mathematics, Mechanics and Computer Science, SFedU, Rostov-on-Don
 V.F. Tishkin, corresponding member RAS, KIAM RAS, Moscow
 M.N. Ustinin, Institute of Mathematical Problems of Biology RAS, Pushchino
 M.Yu. Filimonov, N.N. Krasovskii IMM UB RAS, Yekaterinburg
 B.N. Chetverushkin, academician RAS, KIAM RAS, Moscow

Local committee:

A.L. Afendikov, KIAM RAS, Moscow (*chairman*)
 V.T. Zhukov, KIAM RAS, Moscow (*vice-chairman*)
 A.A. Taiurskii, KIAM RAS, Moscow (*secretary*)
 N.G. Afendikova, KIAM RAS, Moscow
 A.A. Davydov, KIAM RAS, Moscow
 T.V. Konstantinovskaya, KIAM RAS, Moscow
 V.G. Lysov, KIAM RAS, Moscow
 S.A. Makhortyh, IMPB RAS – Branch of KIAM RAS, Pushchino
 N.N. Nazipova, IMPB RAS – Branch of KIAM RAS, Pushchino
 K.E. Nikitin, KIAM RAS, Moscow
 N.D. Novikova, KIAM RAS, Moscow
 A.V. Severin, KIAM RAS, Moscow
 M.N. Ustinin, KIAM RAS, Moscow

СОДЕРЖАНИЕ

И.В. АБАЛАКИН, В.Г. БОБКОВ, Т.К. КОЗУБСКАЯ, Л.К. КУДРЯВЦЕВА, В.О. ЦВЕТКОВА МОДЕЛИРОВАНИЕ ТУРБУЛЕНТНОГО ОБТЕКАНИЯ ТЕЛ, ЗАДАНЫХ МЕТОДОМ ПОГРУЖЕННЫХ ГРАНИЦ, НА АДАПТИВНЫХ НЕСТРУКТУРИРОВАННЫХ СЕТКАХ В РЕАЛЬНЫХ ЗАДАЧАХ АЭРОДИНАМИКИ.....	16
В.В. АКСЁНОВ, А.В. ВАСЮКОВ, К.А. БЕКЛЕМЫШЕВА, И.Б. ПЕТРОВ ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ ОБРАТНОЙ КОЭФФИЦИЕНТНОЙ ЗАДАЧИ ДЛЯ УРАВНЕНИЯ ГАРМОНИЧЕСКИХ КОЛЕБАНИЙ ТОНКОЙ АНИЗОТРОПНОЙ ПЛАСТИНЫ	17
А.К. АЛЕКСЕЕВ, А.Е. БОНДАРЁВ О ПОСТРОЕНИИ УНИВЕРСАЛЬНОГО ВАРИАНТА МЕТОДА ПРАГЕРА-СИНГА	19
А.К. АЛЕКСЕЕВ, А.Е. БОНДАРЁВ, Ю.С. ПЯТАКОВА О СРАВНЕНИИ ТЕНЗОРНЫХ РАЗЛОЖЕНИЙ	20
П.С. АРОНОВ, М.П. ГАЛАНИН, А.С. РОДИН ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ КОНТАКТНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ЭЛЕМЕНТОВ ТВЭЛА С УЧЕТОМ ПОЛЗУЧЕСТИ	22
Д.А. АРХИПОВ, Э.П. ШУРИНА АППРОКСИМАЦИЯ ТОРОИДАЛЬНОЙ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОЙ КАТУШКИ ЭФФЕКТИВНЫМ МАГНИТНЫМ ТОКОМ	23
Н.Д. БАЙКОВ, А.Г. ПЕТРОВ О ЧИСЛЕННОМ МОДЕЛИРОВАНИИ ДЕФОРМАЦИИ СВОБОДНОЙ ГРАНИЦЫ, ВЫЗЫВАЕМОЙ ДВИЖЕНИЕМ ЗАТОПЛЕННОГО ТЕЛА	24
Н.К. БАЛАБАЕВ 4D-МОЛЕКУЛЯРНАЯ ДИНАМИКА	25
С.И. БЕЗРОДНЫХ АНАЛИТИЧЕСКОЕ ПРОДОЛЖЕНИЕ ГИПЕРГЕОМЕТРИЧЕСКОЙ ФУНКЦИИ ЛАУРИЧЕЛЛЫ И ПРИЛОЖЕНИЕ.....	26
С.И. БЕЗРОДНЫХ, В.И. ВЛАСОВ АСИМПТОТИКА ЗАДАЧИ РИМАНА – ГИЛЬБЕРТА ДЛЯ МОДЕЛИ СОМОВА МАГНИТНОГО ПЕРЕСОЕДИНЕНИЯ В ПЛАЗМЕ	27

В.Н. БЕЛЫХ

ОЦЕНКИ АЛЕКСАНДРОВСКОГО N-ПОПЕРЕЧНИКА КОМПАКТА
 ПЕРИОДИЧЕСКИХ БЕСКОНЕЧНО ДИФФЕРЕНЦИРУЕМЫХ ФУНКЦИЙ29

Э.А. БИБЕРДОРФ

РАЗДЕЛЕНИЕ МАТРИЧНОГО СПЕКТРА ОТНОСИТЕЛЬНО КРИВОЙ В
 ПРИКЛАДНЫХ ЗАДАЧАХ.....30

А.И. БОЙКО, М.Н. УСТИНИН, С.Д. РЫКУНОВ

ПРЯМОЕ КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДАННЫХ
 ЭЛЕКТРОФИЗИОЛОГИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ.....31

В.Е. БОРИСОВ, Т.В. КОНСТАНТИНОВСКАЯ, А.Е. ЛУЦКИЙ

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ СВЕРХЗВУКОВЫХ ВИХРЕЙ С ПОВЕРХНОСТЬЮ32

М.А. BOTCHEV, L.A. KNIZHNERMAN, M. SCHWEITZER

SOLVING LARGE LINEAR SYSTEMS OF SECOND ORDER DIFFERENTIAL EQUATIONS
 BY KRYLOV SUBSPACES: RESIDUAL AND RESTARTING33

К.В. БРУШЛИНСКИЙ, В.В. КРЮЧЕНКОВ, Е.В. СТЕПИН

ЧИСЛЕННЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ УСТОЙЧИВОСТИ РАВНОВЕСИЯ В МАГНИТНЫХ
 ЛОВУШКАХ ДЛЯ УДЕРЖАНИЯ ПЛАЗМЫ35

Д.Н. БУХАРОВ

МОДЕЛИРОВАНИЕ СИСТЕМЫ AG/AU НАНОКЛАСТЕРОВ.....36

**В.С. БЫСТРОВ, Е.В. ПАРАМОНОВА, И.В. ЛИХАЧЕВ, Л.А. АВАКЯН,
Н.В. БУЛИНА**

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ В
 ИССЛЕДОВАНИЯХ СТРУКТУРНЫХ И ФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ
 МОДИФИЦИРОВАННОГО ГИДРОКСИАПАТИТА.....37

В.П. ВАРИН

АНАЛИТИЧЕСКИЙ ПЕРВЫЙ ИНТЕГРАЛ С ФРАКТАЛЬНОЙ ЕСТЕСТВЕННОЙ
 ГРАНИЦЕЙ39

В.В.ВЕДЕНЯПИН, А.Г.ПЕТРОВ

УРАВНЕНИЕ ВЛАСОВА-ЭЙНШТЕЙНА И ТОЧКИ ЛАГРАНЖА.40

М.П. ГАЛАНИН, А.С. РОДИН

МОДЕЛИРОВАНИЕ КОНТАКТНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ТЕЛ НА
 НЕСОГЛАСОВАННЫХ СЕТКАХ С ПОМОЩЬЮ МЕТОДА ДЕКОМПОЗИЦИИ
 ОБЛАСТИ.....41

В.А. ГАЛКИН, А.О. ДУБОВИК

АНАЛИТИЧЕСКИЕ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ ГИДРОДИНАМИКИ, СВЯЗАННЫЕ С
НЕФТЕГАЗОВОЙ ОТРАСЛЮ 43

А.О. ГУСЕВ, О.В. ЩЕРИЦА, О.С. МАЖОРОВА

ЧИСЛЕННЫЙ МЕТОД РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ О ФАЗОВОМ ПЕРЕХОДЕ В
МНОГОКОМПОНЕНТНОМ РАСТВОРЕ 44

В.В. ДЕНИСЕНКО, С.В. ФОРТОВА

ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛАСТИЧЕСКОЙ ТУРБУЛЕНТНОСТИ В
ОГРАНИЧЕННОЙ ДВУМЕРНОЙ ЯЧЕЙКЕ 45

Т.В. ДУДНИКОВА

О СТАЦИОНАРНЫХ НЕРАВНОВЕСНЫХ СОСТОЯНИЯХ В СИСТЕМЕ «ПОЛЕ-
КРИСТАЛЛ» 46

В.Т. ЖУКОВ, Н.Д. НОВИКОВА, О.Б. ФЕОДОРИТОВА

О РАСЧЕТЕ НЕСТАЦИОНАРНЫХ МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ ТЕЧЕНИЙ С УЧЕТОМ
СОПРЯЖЕННОГО ТЕПЛООБМЕНА..... 47

Н.А. ЗАЙЦЕВ

РАСЧЁТ КОЭФФИЦИЕНТОВ ОПЕРАТОРА ПРОЗРАЧНЫХ ГРАНИЧНЫХ УСЛОВИЙ
ДЛЯ ВОЛНОВОГО УРАВНЕНИЯ В КРУГЛОМ КАНАЛЕ..... 48

П.А. ЗЕЛЕНЧУК, В.Г. ЦИБУЛИН

АНАЛИТИЧЕСКОЕ РЕШЕНИЕ И ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ ДЛЯ
МОДЕЛИ «ХИЩНИК-ЖЕРТВА» НА НЕОДНОРОДНОМ АРЕАЛЕ..... 49

А.А. ЗЛОТНИК

О ПАРАБОЛИЧЕСКОМ И ГИПЕРБОЛИЧЕСКОМ 2-ГО ПОРЯДКА ВОЗМУЩЕНИЯХ
ГИПЕРБОЛИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ 1-ГО ПОРЯДКА..... 50

А.А. ЗЛОТНИК, Т.А. ЛОМОНОСОВ

L^2 -ДИССИПАТИВНОСТЬ ЛИНЕАРИЗОВАННОЙ ЯВНОЙ РАЗНОСТНОЙ СХЕМЫ НА
РАЗНЕСЕННЫХ СЕТКАХ ДЛЯ 1D УРАВНЕНИЙ БАРОТРОПНОЙ ГАЗОВОЙ
ДИНАМИКИ С РЕГУЛЯРИЗАЦИЕЙ..... 51

А.А. ЗЛОТНИК, А.С. ФЕДЧЕНКО

О СВОЙСТВАХ АГРЕГИРОВАННОЙ КВАЗИГАЗОДИНАМИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ
УРАВНЕНИЙ ГОМОГЕННОЙ ГАЗОВОЙ СМЕСИ..... 52

Н.В. ИВАНОВА, М.П. ШАШКОВ, А.В. ЛЕБЕДЕВ, В.Н. ШАНИН

ПОИСК ОПТИМАЛЬНОГО МЕТОДА ДЛЯ ДЕШИФРИРОВАНИЯ
КАТАСТРОФИЧЕСКИХ ВЕТРОВАЛЬНЫХ НАРУШЕНИЙ В МАЛОНАРУШЕННЫХ
ЛЕСАХ ПО ДИСТАНЦИОННЫМ ДАННЫМ 54

В.М. ИМАЙКИН ОБ УСТОЙЧИВОСТИ СОЛИТОНОВ СИСТЕМЫ МАКСВЕЛЛА-ЛОРЕНЦА С ВРАЩЕНИЕМ.....	55
Е.И. КАПЦОВ СИММЕТРИИ, ЗАКОНЫ СОХРАНЕНИЯ И ИНВАРИАНТНЫЕ СХЕМЫ ДЛЯ СИСТЕМ ГИДРОДИНАМИЧЕСКОГО ТИПА.....	56
Н.В. КЛЮШНЕВ, Ю.Г. РЫКОВ ЧИСЛЕННЫЙ РАСЧЕТ ДИНАМИКИ ПРИЛИПАНИЯ В ДВУМЕРНОМ СЛУЧАЕ	57
И.Ю. КОЛЕСНИКОВ РАЗЛОЖЕНИЯ В ИНТЕРПОЛЯЦИОННЫЕ РЯДЫ ФУРЬЕ УЛУЧШЕННОЙ СХОДИМОСТИ ВДОЛЬ СТОРОН КВАДРАТА И РЕБЕР КУБА ДЛЯ РЕШЕНИЙ ЗАДАЧИ ДИРИХЛЕ	58
В.А. КОЛОМБЕТ, В.Н. ЛЕСНЫХ, А.В. ЕЛИСТРАТОВ “РАСЩЕПЛЕНИЕ” КВАТЕРНИОНА	60
А.В. КОПТЕВ МЕТОД РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЙ ЭЙЛЕРА ДЛЯ ДВИЖЕНИЯ СЖИМАЕМОЙ СРЕДЫ	62
А.Н. КОРШУНОВА, В.Д. ЛАХНО ХОЛСТЕЙНОВСКИЙ ПОЛЯРОН В ПОСТОЯННОМ И СОВМЕСТНОМ ДЕЙСТВИИ ПОСТОЯННОГО И ПЕРЕМЕННОГО ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПОЛЕЙ	64
М.М. КРАСНОВ, О.Б. ФЕОДОРИТОВА ИСПОЛЬЗОВАНИЕ БИБЛИОТЕКИ ФУНКЦИОНАЛЬНОГО ПРОГРАММИРОВАНИЯ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЧИСЛЕННЫХ ЗАДАЧ НА ГРАФИЧЕСКИХ УСКОРИТЕЛЯХ С ТЕХНОЛОГИЕЙ CUDA	67
А.Ю. КУТИЩЕВА, Э.П. ШУРИНА ПРИМЕНЕНИЕ МНОГОМАСШТАБНЫХ МЕТОДОВ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ УПРУГОЙ ДЕФОРМАЦИИ ГЕОЛОГИЧЕСКИХ СРЕД	69
В.С. ЛАПОНИН, С.А. СКЛАДЧИКОВ, С.В. АНПИЛОВ, Н.П. САВЕНКОВА ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ВИХРЕВЫХ СТРУКТУР НА УСТОЙЧИВОСТЬ НЕЛИНЕЙНЫХ ВОЛН	70
В.Д. ЛАХНО БИОИНФОРМАТИКА И НАНОБИОЭЛЕКТРОНИКА	71
З.Д. ЛИВЕНЕЦ, А.Ю. ЛУГОВСКИЙ ФОРМИРОВАНИЕ И ЭВОЛЮЦИЯ КРУПНОМАСШТАБНЫХ ВИХРЕВЫХ СТРУКТУР В АККРЕЦИОННЫХ ЗВЕЗДНЫХ ДИСКАХ.....	72

И.В. ЛИХАЧЕВ

ПРОБЛЕМА ХРАНЕНИЯ И ОБРАБОТКИ ТРАЕКТОРИЙ МОЛЕКУЛЯРНОЙ
ДИНАМИКИ В СУБД 74

В.Ю. ЛУНИН

РАСЧЕТ И ИСПОЛЬЗОВАНИЕ КАРТ ПЕРЕМЕННОГО РАЗРЕШЕНИЯ В
СТРУКТУРНОЙ БИОЛОГИИ 75

Н.Л. ЛУНИНА, В.Ю. ЛУНИН

ОЦЕНКА ЛОКАЛЬНОГО РАЗРЕШЕНИЯ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ КАРТ В
СТРУКТУРНОЙ БИОЛОГИИ 76

Ф.А. МАКСИМОВ

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕЧЕНИЙ ОКОЛО КРЫЛЬЕВ СО СВЕРХЗВУКОВЫМИ
КРОМКАМИ..... 77

С.И. МАРКОВ, Э.П. ШУРИНА, Н.Б. ИТКИНА

МНОГОМАСШТАБНОЕ МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИКИ
ФЛЮИДОВ С РЕОЛОГИЧЕСКИМИ СВОЙСТВАМИ НЬЮТОНОВСКИХ ЖИДКОСТЕЙ
В ГЕОЛОГИЧЕСКИХ СРЕДАХ ПРИ ИСПОЛЬЗОВАНИИ ИХ ДИСКРЕТНЫХ
ГЕОМЕТРИЧЕСКИХ АНАЛОГОВ..... 78

С.А. МАХОРТЫХ, А.В. МОСКАЛЕНКО

ПОСТРОЕНИЕ ВИРТУАЛЬНОЙ МЕДИКО-БИОЛОГИЧЕСКОЙ ВЕБ-ЛАБОРАТОРИИ
С ДОСТУПОМ К НРС-РЕСУРСАМ ЧЕРЕЗ ВЕБ-КЛИЕНТОВ 80

И.С. НИКИТИН, В.И. ГОЛУБЕВ, А.А. СКУБАЧЕВСКИЙ

СХЕМЫ ПОВЫШЕННОГО ПОРЯДКА АППРОКСИМАЦИИ ДЛЯ РАСЧЕТА
ДИНАМИКИ ВЯЗКОПЛАСТИЧЕСКИХ СРЕД 81

И.С. НИКИТИН, А.Д. НИКИТИН, Б.В. ВОЛКОВ

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РОСТА И ВЕТВЛЕНИЯ УСТАЛОСТНЫХ
КВАЗИТРЕЩИН 82

Л. Л. ОГОРОДНИКОВ, С. С. ВЕРГЕЛЕС

АЛЬФА-ЭФФЕКТ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ В ПРИСУТСТВИИ ТРЕХМЕРНОГО
КОГЕРЕНТНОГО ВИХРЯ ПРОВОДЯЩЕЙ ЖИДКОСТИ..... 83

А.Н. ПАНКРАТОВ, Н.М. ПАНКРАТОВА

КОРРЕЛЯЦИОННЫЙ ИНТЕГРАЛ В ОЦЕНКЕ ЭФФЕКТИВНОСТИ
СПЕКТРАЛЬНОГО МЕТОДА ОБНАРУЖЕНИЯ ПОВТОРОВ 85

А.Ю. ПЕРЕВАРЮХА

МОДЕЛИРОВАНИЕ РАЗВИТИЯ ПОПУЛЯЦИОННЫХ ИНВАЗИЙ С УЧЕТОМ
СТОХАСТИЧЕСКИХ ВОЗМУЩЕНИЙ..... 86

А.Г. ПЕТРОВ

О ПРИМЕНЕНИИ СХЕМ С ЭКСПОНЕНЦИАЛЬНОЙ СХОДИМОСТЬЮ К РЕШЕНИЮ
ЗАДАЧ ГИДРОДИНАМИКИ88

**Т.Е. ПЕТРОВА, В.Г. ГРИГОРЕНКО, С. CAROLAN, М.Ю. РУБЦОВА,
И.В. УПОРОВ, J. PEREIRA, G. CHOJNOWSKI, В.Р. САМЫГИНА, В.С. ЛАМЗИН,
А.М. ЕГОРОВ**

ОПРЕДЕЛЕНИЕ СТРУКТУРЫ ТЕМ-171 В-ЛАКТАМАЗЫ И ЕЕ КОМПЛЕКСОВ С
ИНГИБИТОРАМИ.....89

В.О. ПОДРЫГА, С.В. ПОЛЯКОВ, Н.И. ТАРАСОВ, В.А. УСАЧЕВ

ДУХМАСШТАБНЫЙ ПОДХОД К МОДЕЛИРОВАНИЮ ПРОЦЕССОВ
ГАЗОДИНАМИЧЕСКОГО НАПЫЛЕНИЯ.....90

Р.В. ПОЛОЗОВ, Т.И. ГРОХЛИНА, Л.А. ПАНЧЕНКО, В.В. ИВАНОВ

МНОГОМЕРНЫЙ СТАТИСТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ ПРОСТРАНСТВЕННЫХ СТРУКТУР
ДНК В КОМПЛЕКСАХ ГОМЕОДОМЕННЫЙ БЕЛОК - ДНК91

С.В. ПОЛЯКОВ, Е.А. ГАЛСТЬЯН, Н.И. ТАРАСОВ, Т.А. КУДРЯШОВА

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭМИССИОННЫХ ПРОЦЕССОВ В СИЛЬНЫХ
ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ПОЛЯХ92

И.И. ПОТАПОВ, А.Г. ПЕТРОВ, А.С.ЕПИХИН, А.Д. БРИТОВ

МОДЕЛИРОВАНИЕ ОБТЕКАНИЯ КРУГОВОГО ЦИЛИНДРА ВБЛИЗИ
РАЗМЫВАЕМОЙ ДОННОЙ ПОВЕРХНОСТИ.....94

Д.И. ПОТАПОВ, И.И. ПОТАПОВ

РАЗВИТИЕ БЕРЕГОВОГО ОТКОСА В РУСЛЕ ТРАПЕЦИЕВИДНОГО КАНАЛА95

И.И. ПОТАПОВ, О.В. РЕШЕТНИКОВА

ВЛИЯНИЕ ГЕОМЕТРИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ НА ТОЧНОСТЬ ИНТЕРПОЛЯЦИЙ
ФУНКЦИЙ В МЕТОДЕ SPH96

И.И. ПОТАПОВ, Ю.Г. СИЛАКОВА

О РАЗВИТИИ ВОЛНОВЫХ ВОЗМУЩЕНИЙ ДОННОЙ ПОВЕРХНОСТИ В РЕКАХ И
КАНАЛАХ.....97

И.И. ПОТАПОВ, П.С. ТИМОШ

ОБ АЛГОРИТМЕ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ МЕЛКОЙ ВОДЫ МЕТОДОМ ЦЕНТРАЛЬНЫХ
РАЗНОСТЕЙ С КОРРЕКЦИЕЙ FST98

О.С. РОЗАНОВА

О ПОРОГОВЫХ ЯВЛЕНИЯХ ДЛЯ УРАВНЕНИЙ ЭЙЛЕРА-ПУАССОНА99

В.Р. РУДНЕВ, Д.В. ПЕТРОВСКИЙ, К.С. НИКОЛЬСКИЙ, Л.И. КУЛИКОВА, А.В. ЕФИМОВ, А.Л. КАЙШЕВА PSSKB: БАЗА ЗНАНИЙ СТРУКТУРНЫХ МОТИВОВ БЕЛКОВ.....	100
С.Д. РЫКУНОВ, А.И. БОЙКО, М.Н. УСТИНИН ИССЛЕДОВАНИЕ КОРРЕЛЯЦИЙ МЕЖДУ КОМПАРТМЕНТАМИ МОЗГА МЕТОДОМ ВИРТУАЛЬНЫХ ЭЛЕКТРОДОВ.....	101
С.А. СКЛАДЧИКОВ, Н.П. САВЕНКОВА, В.С. ЛАПОНИН, С.В. АНПИЛОВ ОПРЕДЕЛЕНИЕ СТРУКТУРЫ ДВИЖЕНИЯ ЖИДКОСТИ ПРИ ВВЕДЕНИИ ЛЕКАРСТВА В ГЛАЗ ПОСРЕДСТВОМ УКОЛА.....	102
А.Д. СУХОВ, А.Г. ПЕТРОВ, И.Н. СИБГАТУЛЛИН, А.С. ЕПИХИН РАСЧЕТ АЭРОДИНАМИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ЭЛЛИПТИЧЕСКИХ ПРОФИЛЕЙ ПОЛУАНАЛИТИЧЕСКИМ МЕТОДОМ	103
А.А. ТАЮРСКИЙ ИССЛЕДОВАНИЕ НЕЛИНЕЙНОГО ПОГЛОЩЕНИЯ АЛЬФВЕНОВСКОЙ ВОЛНЫ С УЧЁТОМ НЕОДНОРОДНОСТИ.....	105
У.А. ТРОФИМОВ, М.М. ЛОГИНОВА, В.А. ЕГОРЕНКОВ ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ИТЕРАЦИОННЫХ МЕТОДОВ ПРИ ЧИСЛЕННОМ РЕШЕНИИ ТРЕХМЕРНОЙ ЗАДАЧИ ГЕНЕРАЦИИ ЛАЗЕРО-ИНДУЦИРОВАННОЙ ПОЛУПРОВОДНИКОВОЙ ПЛАЗМЫ	106
С.А. ТРОФИМОВА, Н.Б. ИТКИНА, Э.П. ШУРИНА СВОЙСТВА ДИСКРЕТНЫХ АНАЛОГОВ СМЕШАННОЙ ПОСТАНОВКИ НА БАЗЕ РАЗРЫВНОГО МЕТОДА ГАЛЁРКИНА ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ ДАРСИ	107
М.Н. УСТИНИН, С.Д. РЫКУНОВ, А.И. БОЙКО РЕКОНСТРУКЦИЯ ФУНКЦИОНАЛЬНОЙ СТРУКТУРЫ ТЕЛА ЧЕЛОВЕКА ПО ДАНЫМ МНОГОКАНАЛЬНЫХ ИЗМЕРЕНИЙ.....	108
Н.С. ФИАЛКО ЗАДАЧА ПЕРЕНОСА ДЫРКИ В ТРНК НА ОСНОВЕ МОДЕЛИ ПЕРЕНОСА ЗАРЯДА В ДНК.....	109
Н.С. ФИАЛКО, М.М. ОЛЬШЕВЕЦ, В.Д. ЛАХНО О ДИНАМИКЕ ХОЛСТЕЙНОВСКОГО ПОЛЯРОНА ПРИ РАЗНЫХ СПОСОБАХ ЗАДАНИЯ ТЕМПЕРАТУРЫ.....	111
А.А. ФРОЛОВ, Е.В. ЧИЖОНКОВ О МОДЕЛИРОВАНИИ ЦИЛИНДРИЧЕСКОЙ МЕДЛЕННОЙ НЕОБЫКНОВЕННОЙ ВОЛНЫ	112

А.П.ЧЕТВЕРИКОВ, Е.И.ГЕРАСЬКИН, В.Д.ЛАХНО

ЛОКАЛИЗОВАННЫЕ ВОЛНЫ В ЦЕПОЧКАХ СВЯЗАННЫХ ЧАСТИЦ С
ПОПЕРЕЧНЫМИ СМЕЩЕНИЯМИ: ВОЗБУЖДЕНИЕ, ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ,
МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ **113**

П.А.ЧУПРОВ

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ДВУМЕРНЫХ ДВУХФАЗНЫХ СХЕМ ДЛЯ РЕШЕНИЯ
СИСТЕМЫ УРАВНЕНИЙ БАЕРА-НУНЦИАТО НА ПРИМЕРЕ ЗАДАЧИ РИМАНА. **114**

Э.П. ШУРИНА, Д.В. ДОБРОЛЮБОВА, А.Ю. КУТИЩЕВА, Е.И. ШТАНЬКО

АЛГОРИТМ ВЫЧИСЛЕНИЯ ЭФФЕКТИВНОЙ ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТИ
ГЕТЕРОГЕННОЙ СРЕДЫ НА ОСНОВЕ РЕЗУЛЬТАТОВ ПРЯМОГО
КОНЕЧНОЭЛЕМЕНТНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ..... **115**

АЛФАВИТНЫЙ УКАЗАТЕЛЬ..... 117

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТУРБУЛЕНТНОГО ОБТЕКАНИЯ ТЕЛ, ЗАДАНЫХ МЕТОДОМ ПОГРУЖЕННЫХ ГРАНИЦ, НА АДАПТИВНЫХ НЕСТРУКТУРИРОВАННЫХ СЕТКАХ В РЕАЛЬНЫХ ЗАДАЧАХ АЭРОДИНАМИКИ

И.В. Абалакин¹, В.Г. Бобков¹, Т.К. Козубская¹, Л.К. Кудрявцева², **В.О. Цветкова¹**

¹*Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН*

²*Вычислительный центр им. А.А. Дородницына ФИЦ ИУ РАН, Москва*
lera.tsvetkova@gmail.com

В настоящее время активно развиваются различные подходы к моделированию турбулентного течения вблизи движущихся препятствий или тел с движущимися частями. Данная работа исследует возможность решения подобных задач, используя метод погруженных границ (Immersed Boundary Method, IBM) в комбинации с алгоритмом адаптации подвижной неструктурированной сетки. IBM [1] моделирует присутствие твердого тела, путем добавления источников членов в газодинамические уравнения и позволяет использовать односвязные вычислительные области. Алгоритм адаптации [2] перераспределяет вершины исходной неструктурированной квазиравномерной сетки без изменения ее топологии для лучшего разрешения поверхности «погруженного» тела. Особую сложность при этом вызывает необходимость подробного разрешения тонких пограничных слоев в задачах с высокими числами Рейнольдса.

В работе рассматривается задача моделирования течения вблизи упрощенной конфигурации фюзеляжа вертолета. На примере этой задачи обсуждаются пределы использования метода адаптации сетки. Качество полученных характеристик оценивается в сравнении с аналогичной постановкой, посчитанной на согласованной с телом сетке с использованием граничных условий прилипания. Была проведена серия вычислительных испытаний для определения влияния качества сетки на точность получаемых аэродинамических характеристик.

Работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (Проект 20-31-90052 Аспиранты) и выполнена с использованием суперкомпьютеров ЦКП ИПМ им. М.В. Келдыша РАН.

Список литературы:

1. Angot, Ph., Bruneau, C.-H., Fabrie, P. A penalization method to take into account obstacles in incompressible viscous flows // Numer. Math., 1999, 81(4): 497–520.
2. Garanzha, V., Kudryavtseva, L. Hypoelastic Stabilization of Variational Algorithm for Construction of Moving Deforming Meshes // In: Evtushenko Y., Jacimovic M., Khachay M., Kochetov Y., Malkova V., Porypkin M. (eds) Optimization and Applications. OPTIMA 2018.Comm. in Comp. and Inf. Science 974: 497–511

**ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ ОБРАТНОЙ
КОЭФФИЦИЕНТНОЙ ЗАДАЧИ ДЛЯ УРАВНЕНИЯ
ГАРМОНИЧЕСКИХ КОЛЕБАНИЙ ТОНКОЙ
АНИЗОТРОПНОЙ ПЛАСТИНЫ**

В.В. Аксёнов¹, **А.В. Васюков**², К.А. Беклемышева³,
И.Б. Петров⁴

¹*Московский физико-технический институт, aksenov.vv@phystech.edu*

²*Московский физико-технический институт, vasyukov.av@mipt.ru*

³*Московский физико-технический институт, beklemysheva.ka@mipt.ru*

⁴*Московский физико-технический институт, petrov@mipt.ru*

В работе рассматривается численная методика получения упругих параметров изотропных и анизотропных пластин по данным вибрационных испытаний. Данная задача актуальна при мелкосерийном производстве деталей из экспериментальных материалов [1, 2]. Прямая задача формулируется как серия краевых задач для уравнения в частных производных. В расчётах рассматривается переменная частота вынуждающих колебаний при фиксированных вязкоупругих параметрах материала и геометрии образца. Общая постановка прямой задачи близка к рассмотренной в [3]. В результате решения прямой задачи формируется расчётная амплитудно-частотная характеристика образца, пример которой приведён на рисунке 1.

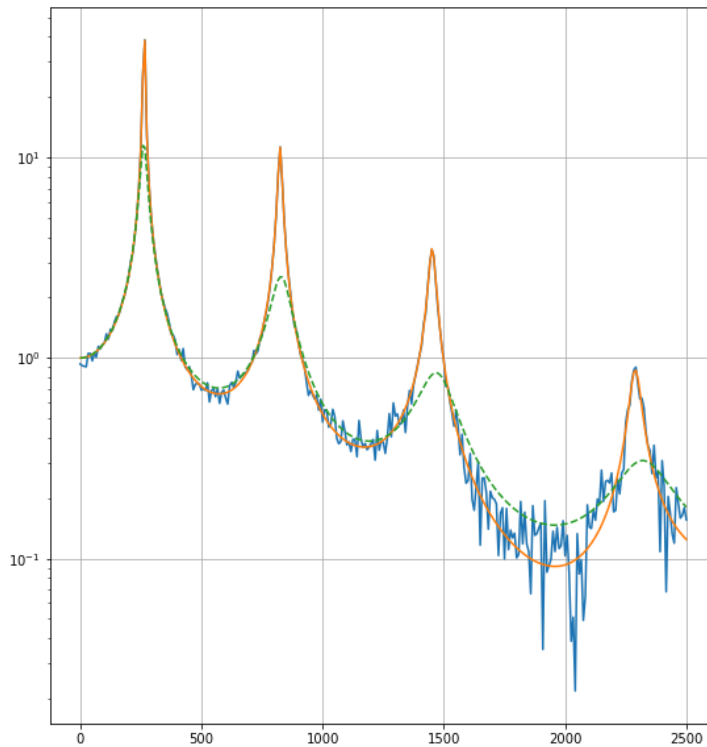


Рис.1. АЧХ для анизотропного образца при наличии шума.

Обратная задача получения параметров материала по данным испытаний формулируется как задача минимизации функционала среднеквадратичной ошибки между измеренной и полученной численно амплитудно-частотной характеристикой. Простая структура прямой задачи позволяет применять метод автоматического дифференцирования для эффективного вычисления производных данного функционала по параметрам [4]. При малом числе параметров и наличии хорошего начального приближения предлагается использовать метод доверительной области (trust-region method) [5]. Начальное приближение, в свою очередь, может быть найдено с помощью эвристического метода дифференциальной эволюции [6]. Применимость данного подхода демонстрируется в серии численных экспериментов для изотропной стальной пластины и ортотропной пластины из углепластика. Для обоих видов материалов в численных экспериментах получено хорошее качество определения реологических параметров, в том числе при наличии шума во входных данных.

Работа поддержана грантом РФФ 22-11-00142.

Список литературы:

1. Мадеев С.В., Ловцов А.С., Лаптев И.Н. Определение эксплуатационных характеристик образцов конструкционных материалов из углерод-углеродного композита для электродов ионных двигателей // Композиты и наноструктуры. 2016. Т.81, №2 (30), с.140-150.

2. Nishiyama K., Shimizu Y., Kuninaka H. et al. Research and Development Status of Microwave Discharge Ion Thruster $\mu 20$ // 29th International Electric Propulsion Conference. 2005. Pp. 3–5.
3. Tuan P.H., Wen C.P., Chiang P.Y. et al. Exploring the resonant vibration of thin plates: reconstruction of Chladni patterns and determination of resonant wave numbers // The Journal of the Acoustical Society of America. 2015. Vol. 137, No. 4, pp. 2113–2123.
4. Evtushenko Y. Computation of exact gradients in distributed dynamic systems // Optimization Methods and Software. 1998. Vol. 9, No. 1-3, pp. 45–75.
5. Gonglin Y., Shide M., Zengxin W. A trust-region-based BFGS method with line search technique for symmetric nonlinear equations // Advances in Operations Research. 2009. Vol. 2009, Article ID 909753.
6. Rainer S., Kenneth P. Differential evolution – a simple and efficient heuristic for global optimization over continuous spaces // Journal of global optimization. 1997. Vol. 11, No. 4, pp. 341–359.

О ПОСТРОЕНИИ УНИВЕРСАЛЬНОГО ВАРИАНТА МЕТОДА ПРАГЕРА-СИНГА

А.К. Алексеев^{1,2}, А.Е. Бондарев²

¹*РКК Энергия, г. Королев, aleksey.k.alekseev@gmail.com*

²*ИПМ им М.В. Келдыша РАН, Москва, Россия, bond@keldysh.ru*

Метод Прагера-Синга [1] разработан для анализа погрешности аппроксимации конечно-элементных решений уравнения Пуассона $\nabla^2 \tilde{u} = \rho$, $u_\Gamma = f$ и использует подпространство градиентов $\partial v / \partial x_i$ функций $v \in H^1$, удовлетворяющих граничным условиям $v_\Gamma = f$, и подпространство вектор-функций $q \in H^1$, таких, что $\operatorname{div}(q) = \rho$. При этом выполняется условие ортогональности $((\nabla v - \nabla \tilde{u}), (q - \nabla \tilde{u})) = 0$. $v \in H^1(R^N)$ трактуется как численное решение u_h . Соотношение ортогональности позволяет получить оценку погрешности $\|\nabla(\tilde{u} - u_h)\| < \|\nabla u_h - q\| = 2R$. Этот метод позволяет оценить погрешность аппроксимации из чисто геометрических идей. При этом, наличие последовательности сеток и сходимости численного решения не используются, а измельчение/сгущение сетки выполняется, только если величина R не приемлема с практической точки зрения (что можно проверить с помощью неравенства Коши-Буняковского). Таким образом, этот подход позволяет ослабить "тиранию" измельчения и адаптации сетки,

которая определяет основные трудности вычислительной аэрогазодинамики. Основным недостатком метода является узкий диапазон применимости. Поэтому в [2] предложен универсальный вариант, основанный на существовании вспомогательного решения $u_{\perp}$, такого, что его погрешность ортогональна погрешности численного решения $u_h^{(i)}$: $(u_h^{(i)} - \tilde{u}_h, u_{\perp} - \tilde{u}_h)_{\Omega} = (\Delta \tilde{u}_h^{(i)}, \Delta \tilde{u}_{\perp})_{\Omega} = 0$. С учетом связи между погрешностями усечения и аппроксимации $\Delta u_h^{(i)} = A_h^{-1} \delta u_h^{(i)}$ можно получить $(\Delta u_h^{(i)}, \Delta u_{\perp})_{\Omega} = (A_h^{-1} \delta u_h^{(i)}, A_h^{-1} \delta u_{\perp})_{\Omega} = (\delta u_h^{(i)}, A_h^{-1*} A_h^{-1} \delta u_{\perp})_{\Omega} = (\delta u_h^{(i)}, \theta)_{\Omega} = 0$. В итоге, оценив погрешность усечения $\delta u_h^{(i)}$ и построив некоторый ортогональный к ней вектор θ можно найти погрешность вспомогательного решения $\Delta u_{\perp} = A_h^* \theta$ и получить соответствующие оценки. Мы сравниваем реализацию этого варианта метода Прагера-Синга и полуэмпирического варианта, основанного на анализе ансамбля решений, полученных различными численными методами. При этом оценка погрешности основывается на анализе расстояний между решениями на ансамбле, что соответствует набору неортогональных оценок погрешности аппроксимации. Полуэмпирический вариант проще универсального в реализации и дает близкие по качеству оценки погрешности.

Список литературы:

1. Synge J.L., The Hypercircle in Mathematical Physics, CUP, London, 1957
2. Алексеев А.К., Бондарев А.Е. О методе Прагера-Синга оценки погрешности аппроксимации // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. 2021. № 25. 22 с.

О СРАВНЕНИИ ТЕНЗОРНЫХ РАЗЛОЖЕНИЙ

А.К. Алексеев^{1,2}, А.Е. Бондарев², Ю.С. Пятакова¹

¹*РКК Энергия, г. Королев, Моск. обл., Россия,
aleksey.k.alekseev@gmail.com*

²*ИПМ им М.В. Келдыша РАН, Москва, Россия, bond@keldysh.ru*

Рассмотрены возможности, предоставляемые тензорными разложениями для аппроксимации функции пространстве многих переменных на примере функции $f(x, y, x, u, v, w)$. Мы воспринимаем тензор как многомерный массив, который соответствует сеточной функции, определенной на регулярной сетке в многомерном пространстве. В работе сравнены каноническое разложение и

тензорный поезд [1,2]. Каноническое разложение позволяет записать d -мерный тензор в виде $A(i_1, \dots, i_d) = \sum_{r=1}^R Q_{1,r} Q_{2,r} \dots Q_{d,r}$. Вместо n^d (n - число

узлов по одной переменной) элементов для представления функции оно использует $\sim dnR$ элементов. Тензорный поезд имеет вид

$$A(i_1, \dots, i_d) = \sum_{\alpha_0, \dots, \alpha_d} G_1(\alpha_0, i_1, \alpha_1) G_2(\alpha_1, i_2, \alpha_2) \dots G_d(\alpha_{d-1}, i_d, \alpha_d), \text{ и вместо } n^d \text{ элементов для}$$

представления функции использует $\sim dnR^2$ элементов. Как правило, методы расчета тензорных разложений используют матризацию тензоров, что требует очень большой памяти. Поэтому мы рассматриваем альтернативу, использующую комбинацию метода переменных направлений и стохастического градиентного спуска.

Каноническое разложение имеет вид

$$f_{ijklmp} = \sum_{\alpha} Q^x(\alpha, i) \cdot Q^y(\alpha, j) \cdot Q^z(\alpha, k) \cdot Q^u(\alpha, l) \cdot Q^v(\alpha, m) \cdot Q^w(\alpha, p). \text{ Определим ядро}$$

$Q^x(\beta, i)$ связанное с координатой x (остальные ядра определяются последовательно). Выберем нить вдоль x , ($i=1 \dots N_x$) с помощью случайного равномерно распределенного выбора индексов j, k, l, m, p . Рассмотрим невязку вдоль этой нити ($\tilde{f}_{ijklmp}$ - точное значение функции)

$$\varepsilon(Q^x) = \sum_i^{N_x} \left\{ \sum_{\alpha} Q^x(\alpha, i) \cdot Q^y(\alpha, j) \cdot Q^z(\alpha, k) \cdot Q^u(\alpha, l) \cdot Q^v(\alpha, m) \cdot Q^w(\alpha, p) - \tilde{f}_{ijklmp} \right\}^2 / 2.$$

Градиент невязки:

$$\nabla_{x,i,\beta} \varepsilon = \left(\sum_{\alpha} (Q^x(\alpha, i) \cdot Q^y(\alpha, j) \cdot Q^z(\alpha, k) \cdot Q^u(\alpha, l) \cdot Q^v(\alpha, m) \cdot Q^w(\alpha, p) - \tilde{f}_{ijklmp}) \cdot \right.$$

$$\left. \cdot (Q^y(\beta, j) \cdot Q^z(\beta, k) \cdot Q^u(\beta, l) \cdot Q^v(\beta, m) \cdot Q^w(\beta, p)) \right\}. \text{ Аналогичные выражения}$$

получены и для тензорного поезда. Представлено сравнение

аппроксимации различных функций этими методами. В расчетах

использовалась сетка, содержащая 100 узлов по каждой координате,

требующая 10^{12} ячеек памяти. При использовании канонического

разложения с рангом 100, требуется $6 \cdot 100 \cdot 100 = 60000$ ячеек, что

иллюстрирует степень сжатия информации. Такой же объем памяти

требуется при использовании тензорного поезда с рангом 10.

Список литературы:

1. W. Hackbusch. Tensor Spaces and Numerical Tensor Calculus. Springer, 2012.
2. Oseledets I. V., Tensor- train decomposition, SIAM J. Sci. Comput., 33, pp. 2295–2317, 2011.

ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ КОНТАКТНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ЭЛЕМЕНТОВ ТВЭЛА С УЧЕТОМ ПОЛЗУЧЕСТИ

П.С. Аронов^{1,2}, М.П. Галанин^{1,2}, А.С. Родин^{1,2}

¹*Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН, Москва,
Россия*

²*Московский государственный технический университет им. Н.Э.
Баумана, Москва, Россия, aronovps@mail.ru, galan@keldysh.ru,
rals@bk.ru*

Моделирование термомеханического состояния тепловыделяющего элемента (ТВЭЛ) в энергетических реакторах является актуальной и важной задачей. Одной из главных частей ТВЭЛ является столб из топливных таблеток (их количество обычно составляет несколько сотен), заключенный в цилиндрическую оболочку. Среди многочисленных эффектов, которые необходимо учитывать при детальном моделировании ТВЭЛ, одними из наиболее важных являются контактное взаимодействие таблеток друг с другом и с оболочкой, а также развитие деформаций ползучести на всем временном интервале эксплуатации.

В работе предложены методы численного решения термомеханических задач с учетом ползучести. Учет контактного взаимодействия осуществлен с помощью mortar-метода, для пространственной дискретизации задачи использован метод конечных элементов, в расчетах применены элементы второго порядка на четырехугольной сетке. Для численного решения задачи развития деформаций ползучести предложены алгоритмы решения систем обыкновенных дифференциальных уравнений на основе явного и неявного методов Эйлера с автоматическим выбором шага по времени [1].

Для задачи, моделирующей участок ТВЭЛ в термоупругой постановке, показано, что использование модифицированных итерационных методов решения системы линейных уравнений, возникающей при дискретизации задачи, позволяет учитывать выход из контакта участков контактной поверхности без дополнительного вмешательства в алгоритм. Показано, что для большого числа таблеток минимальное время расчета достигается при использовании модифицированного метода Якоби (например, для фиксированной сетки и 50 таблеток различие в 37 раз по сравнению с GMRES и в 262 раза по сравнению с методом Гаусса).

Учет деформаций ползучести приводит к заметному (в 5-10 раз) уменьшению значений напряжений в конструкции в конце рассматриваемого интервала времени. При моделировании участка твэла с учетом процессов ползучести использование переменного шага позволяет существенно уменьшить количество шагов по времени, а время расчетов уменьшается в 10-15 раз по сравнению с расчетами с постоянным шагом.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-21-00260, <https://rscf.ru/project/22-21-00260/>.

Список литературы:

1. Aronov P.S., Galanin M.P., Rodin A.S. // AIP Conf. Proc 2021 Vol 2448.

АППРОКСИМАЦИЯ ТОРОИДАЛЬНОЙ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОЙ КАТУШКИ ЭФФЕКТИВНЫМ МАГНИТНЫМ ТОКОМ

Д.А. Архипов¹, Э.П. Шурина^{2,1}

¹*Институт нефтегазовой геологии и геофизики им. А.А. Трофимука
СО РАН, d_arhipov@list.ru*

²*Новосибирский государственный технический университет,
shurina@online.sinor.ru*

Основой электроразведочных методов разведки недр земли является измерение электромагнитного поля. Один из таких методов – это скважинный каротаж, заключающийся в измерении ЭДС наведенных в приемных катушках измерительного зонда, состоящего из генераторной катушки и нескольких приемных, как правило, расположенных на одной оси. В качестве источника могут применяться соленоидальные и тороидальные катушки.

Сложностью моделирования таких электромагнитных процессов является аппроксимация источника с учетом всех его физических и геометрических характеристик, так как использование дипольных приближений правомерно только в дальней зоне, т.е. расстояние между генератором и приемником должно быть во много раз больше их размеров, что невозможно в случае расположения их на одном зонде.

Самым менее изученным является тороидальный источник в силу своей сложной геометрической структуры. В работе реализованы и исследованы два способа аппроксимации такого типа источника: непрерывная замкнутая токовая обмотка (источник электрического поля) и эффективный объемный источник магнитного поля (сердечник

катушки). Алгоритм строился на базе векторного метода конечных элементов на не регулярной тетраэдральной сетке. Анализ результатов моделирования показал, что использование эффективной плотности магнитного тока позволяет аппроксимировать тороидальную катушку с любым числом обмотки и обеспечивает более быстрый процесс сходимости решения конечноэлементной СЛАУ.

Работа поддержана проектом FWZZ-2022-0025.

О ЧИСЛЕННОМ МОДЕЛИРОВАНИИ ДЕФОРМАЦИИ СВОБОДНОЙ ГРАНИЦЫ, ВЫЗЫВАЕМОЙ ДВИЖЕНИЕМ ЗАТОПЛЕННОГО ТЕЛА

Н.Д. Байков¹, А.Г. Петров²

¹ФГУ ФНЦ НИИСИ РАН, baikov_nd@rambler.ru

²Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского РАН,
petrovipmech@gmail.com

Важным классом плоских задач гидродинамики являются задачи, изучающие взаимодействие между полностью погруженным в жидкость телом и свободной границей. Тело может быть закреплено, двигаться по заданному закону или наоборот приводиться в движение самим течением жидкости. Например, часто возникает потребность в расчете нагрузок, действующих на тело [1], и в моделировании деформации свободной поверхности, возникающей при всплытии или затопливании тела [2-4]. В настоящей работе предлагается численное приближение рассматриваемой задачи на основе метода граничных элементов для модели идеальной жидкости, позволяющее эффективно моделировать указанные задачи.

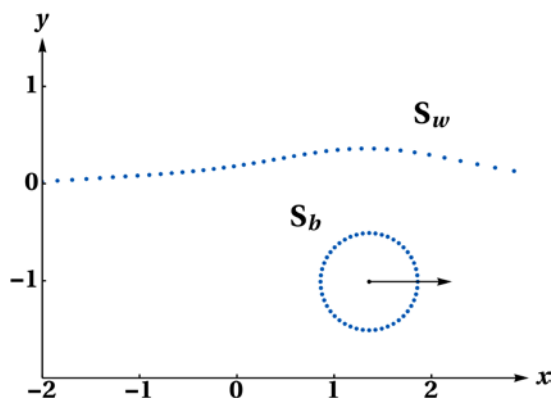


Рис.1. Расчетная область

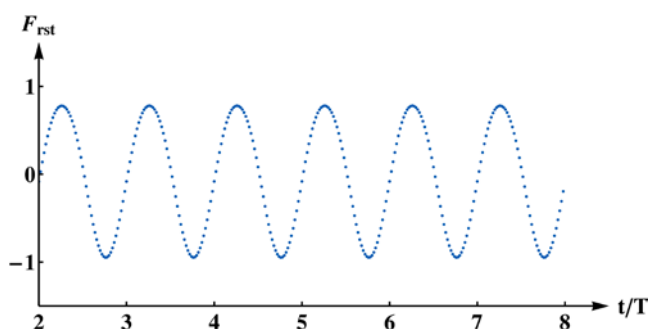


Рис.2. Гидродинамическое сопротивление

Работа поддержана грантом РФФИ № 22-21-00833.

Список литературы:

1. Wang L., Tang H. // The Proceedings of The Twenty-fourth (2014) ISOPE, 2014.
2. Kostikov V.K., Makarenko N.I., Korobkin A.A. // IOP Conf. Ser.: Earth Environ. Sci 2018 № 193 pp. 012036.
3. Kostikov V.K., Makarenko N.I. // Journal of Physics: Conference Series 2016 № 722 pp. 012021.
4. Kostikov V.K., Makarenko N.I. // J Eng Math 2018 № 112 pp. 1–16.

4D-МОЛЕКУЛЯРНАЯ ДИНАМИКА

Н.К. Балабаев

*ИМПБ РАН – филиал ИПМ им. М.В. Келдыша РАН,
balabaevnk@gmail.com*

Моделирование молекулярной динамики в настоящее время стало уже рутинным делом при исследованиях в различных областях теоретической и прикладной науки. В ИМПБ РАН разработкой метода молекулярной динамики занялись еще в 70-х годах прошлого века. Был создан программный комплекс ПУМА для моделирования молекулярных и биомолекулярных систем. Развиваемый вариант этой программы активно используется и в настоящее время. Имеются возможности для моделирования в NVE, NVT, $NP_{\alpha\beta}T$ ансамблях в прямоугольной и косоугольной расчетной ячейке с периодическими граничными условиями.

Моделирование сложных полимерных и биомолекулярных структур ставит особенно остро вопрос о приготовлении представительных начальных данных – координат всех атомов (десятков и сотен тысяч). Одним из возможных инструментов для конструирования сложных систем на основе уже имеющихся объектов является использование 4d-молекулярной динамики. Такая возможность реализована в программном коде ПУМАs, созданном на базе программы ПУМА. К пространственным координатам x, y, z добавлена еще одна координата s . При вычислении невалентных взаимодействий расстояние между частицами i и j вычисляется как $r_{ij} = [(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2 + (s_i - s_j)^2]$.

4d-Молекулярная динамика была применена для включения газовых подсистем в уже созданные и приведенные к равновесным состояниям высокопроницаемые полимерные мембраны [1]. Для

полимерной мембраны все s -координаты атомов были зафиксированы в плоскости $s=0$. Молекулы газовой подсистемы были случайно-равномерно распределены в XYZ-расчетной ячейке с периодическими граничными условиями, а их s -координаты взяты на расстоянии, исключающем стерическое перекрытие с атомами мембраны. На атомы газовой подсистемы было наложено силовое поле в s -направлении в сторону плоскости $s=0$. В процессе моделирования молекулярной динамики величина силы возрастала, заставляя молекулы встраиваться в мембрану. Процесс прекращался, когда все s -координаты атомов становились близки к нулю. С этого момента включалась 3-d молекулярная динамика со своим протоколом релаксации и проведения продуктивных расчетов.

Список литературы:

1. M. Mazo, N. Balabaev, A. Alentiev, Yu. Yampolskii. Molecular dynamics simulation of nanostructure of high free volume polymers with SiMe3 side groups. // *Macromolecules*, 2018, 51(4), p.1398-1408.

АНАЛИТИЧЕСКОЕ ПРОДОЛЖЕНИЕ ГИПЕРГЕОМЕТРИЧЕСКОЙ ФУНКЦИИ ЛАУРИЧЕЛЛЫ И ПРИЛОЖЕНИЕ

С.И. Безродных

ФИЦ ИУ РАН, Москва, sbezrodnykh@mail.ru

Рассматриваемая в работе функция $F_D^{(N)}(\mathbf{a}; b, c; \mathbf{z})$ была введена Дж. Лауричеллой, см. [1], в качестве одного из наиболее естественных обобщений функции Гаусса $F(a, b; c; z)$ на случай N комплексных переменных $(z_1, \dots, z_N) = \mathbf{z} \in \mathbb{C}^N$ и комплексных параметров $(a_1, \dots, a_N) = \mathbf{a} \in \mathbb{C}^N$, b и c . Определением функции $F_D^{(N)}$ служит следующий N -кратный ряд [1], [2]:

$$F_D^{(N)}(\mathbf{a}; b, c; \mathbf{z}) = \sum_{\mathbf{k} \in \mathbb{Z}^+} (b)_{|\mathbf{k}|} (a)_{|\mathbf{k}|} / ((c)_{|\mathbf{k}|} \mathbf{k}!) \mathbf{z}^{\mathbf{k}}, \quad \mathbf{z} \in \mathbb{U}^N, \quad (1)$$

сходящийся в единичном поликруге $\mathbb{U}^N$; здесь $\mathbf{k} = (k_1, \dots, k_N)$ – мультииндекс, $\mathbf{k}! = k_1! \dots k_N!$, $(a)_k = a(a+1) \dots (a+k-1)$ – символ Похгаммера, $(a)_{|\mathbf{k}|} = (a_1)_{k_1} \dots (a_N)_{k_N}$, $\mathbf{z}^{\mathbf{k}} = z_1^{k_1} \dots z_N^{k_N}$. Функция $F_D^{(N)}$ удовлетворяет системе N линейных уравнений с частными производными по переменным z_j , см. [1], [2]. Важной задачей в теории функции Лауричеллы является построение аналитического продолжения ряда (1) во внешность поликруга $\mathbb{U}^N$ в виде набора представлений

$$F_D^{(N)}(\mathbf{a}; \mathbf{b}, \mathbf{c}; \mathbf{z}) = \sum_{j=0}^N \lambda_j u_j(\mathbf{a}; \mathbf{b}, \mathbf{c}; \mathbf{z}), \quad \mathbf{z} \notin \mathbf{U}^N, \quad (2)$$

где функции u_j – обобщенные гипергеометрические ряды, удовлетворяющие той же, что и $F_D^{(N)}$, системе уравнений с частными производными, а λ_j – некоторые коэффициенты. В докладе представлены полученные в [3], [4] формулы аналитического продолжения вида (2) такие, что области их сходимости в совокупности покрывают все N -мерное комплексное пространство $\mathbf{C}^N$; при этом в общем случае указан явный вид функций u_j и коэффициентов λ_j . Дано приложение результатов к эффективному вычислению конформного отображения многоугольников сложного вида в ситуации резко неравномерного распределения прообразов вершин. Подобная ситуация, называемая “кроудингом” и вызывающая трудности при использовании стандартных вычислительных процедур, см. об этом [5], [6], успешно преодолена благодаря формулам аналитического продолжения [3], [4].

Список литературы:

1. Lauricella G. // Rend. Circ. Mat. Palermo. 1893. V. 7. P. 111-158.
2. Exton H. Multiple hypergeometric functions and application. New York: John Willey & Sons, Inc, 1976.
3. Безродных С.И. // Успехи матем. наук. 2018. Т. 73. № 6 (444). С. 3-94.
4. Bezrodnykh S.I. // Integral Transf. Spec. Func. 2022. V.33. № 4. P. 276-291.
5. Trefethen L.N., Driscoll T.A. Schwarz – Christoffel transformation. Cambridge: Cambridge university press, 2005.
6. Banjai L. // SIAM J. on Scientific Computing. 2008. V. 30. № 2. P. 618-636.

АСИМПТОТИКА ЗАДАЧИ РИМАНА – ГИЛЬБЕРТА ДЛЯ МОДЕЛИ СОМОВА МАГНИТНОГО ПЕРЕСОЕДИНЕНИЯ В ПЛАЗМЕ

С.И. Безродных, В.И. Власов

ФИЦ ИУ РАН, sbezrodnykh@mail.ru, vlasov@ccas.ru

Возникающий в плазме Солнечной короны эффект магнитного пересоединения, заключающийся в изменении конфигурации магнитного поля с существенным выделением энергии, играет важную роль в механизме Солнечных вспышек [1]. Магнитное поле в области пересоединения можно рассматривать как плоское, т.е. $\mathbf{B} = (B_x, B_y, 0)$, а

величину $F = B_x - iB_y$ – как аналитическую функцию переменного $z = x + iy$. Модель данного эффекта, предложенная Б.В.Сомовым [1], сводит вычисление магнитного поля к задаче Римана – Гильберта в односвязной области X , представляющей собой внешность системы разрезов $\Gamma_0, \Gamma_1, \dots, \Gamma_4$. Здесь Γ_0 – отрезок $[-R, R]$ вещественной оси – изображает токовый слой (такой же, как в модели С.И. Сыроватского [2] этого эффекта). К его концам присоединены остальные четыре разреза длиной r , изображающие МГД-ударные волны. Эти разрезы Γ_j , $j=1, \dots, 4$, расположены зеркально-симметрично относительно декартовых осей, причем разрез в первом квадранте наклонен к оси x под углом $\pi\alpha \leq \pi/4$. В модели Сомова принимается, что на разрезе Γ_0 нормальная компонента B_n магнитного поля равна нулю, а на разрезах Γ_j , $j=1, \dots, 4$, она постоянна и равна заданной величине $\beta > 0$. Выражая B_n через F и комплексную единичную нормаль v по формуле $B_n(z) = \operatorname{Re} [v(z) F(z)]$, получаем из этих условий требуемую задачу Римана – Гильберта: $\operatorname{Re} [v(z) F(z)] = 0$, $z \in \Gamma_0$; $\operatorname{Re} [v(z) F(z)] = \beta$, $z \in \Gamma_j$, в которой еще предполагается, что поле имеет линейный рост на бесконечности, т.е. $F(z) \sim -i\mu z$, $z \rightarrow \infty$, где $\mu > 0$ – заданный параметр модели. Следует отметить, что модель Сыроватского содержит токовый слой, но не включает ударных волн, тогда как модель Петчека [3], напротив, содержит бесконечно длинные ударные волны. С помощью методов, разработанных в [4] и [5], проведено асимптотическое исследование сформулированной задачи Римана–Гильберта как при укорочении фронта ударных волн, т.е. при $\rho = r/R \rightarrow 0$, так и при их бесконечном вытягивании, т.е. при $\rho \rightarrow \infty$. Оно показало, что при $\rho \rightarrow 0$ и одновременном согласованном порядка $\rho^{-1/2}$ возрастании параметра β , а также фиксированных остальных параметрах R, α, μ модели поле Сомова превращается в поле Сыроватского. Также было установлено, что если $\rho \rightarrow \infty$, а коэффициент μ согласованно уменьшается по закону $\mu = \mu_0 \rho^{(4-\alpha-1)/2(1-2\alpha)}$, то предельное поле Сомова совпадает с полем Петчека. Следовательно, модели Сыроватского и Петчека можно рассматривать как предельные случаи модели Сомова.

Список литературы:

1. Somov B.V. Plasma Astrophysics. Part II, Reconnection and Flares. N.Y.: Springer SBM, 2016.
2. Сыроватский С.И. // ЖЭТФ. 1971. Т. 60. С. 1721-1741.
3. Petschek H.E. // AAS-NASA Symposium “The Physics of Solar Flares”, 1963. NASA Spec. Publ., SP-50, 1964, P. 425-439.
4. Власов В. И. Краевые задачи в областях с криволинейной границей. М.: ВЦ АН СССР, 1987

5. Безродных С.И., Власов В.И. // ЖВМ и МФ. 2014. Т.54. № 12. С. 1904-1953.

ОЦЕНКИ АЛЕКСАНДРОВСКОГО N-ПОПЕРЕЧНИКА КОМПАКТА ПЕРИОДИЧЕСКИХ БЕСКОНЕЧНО ДИФФЕРЕНЦИРУЕМЫХ ФУНКЦИЙ

В.Н. Белых

¹ *Институт математики СО РАН, belykh@math.nsc.ru*

Получены двусторонние квалифицированные оценки александровского n-поперечника [1,2] компакта периодических бесконечно гладких функций, ограниченно вложенного в пространство функций, непрерывных на единичной окружности. Результат основывается на предложенной ранее автором [3] характеристике бесконечно дифференцируемых периодических функций, апеллирующей к её наилучшему чебышёвскому описанию тригонометрическими многочленами. Результат возник как реакция на реальную потребность вычислительной гидродинамики [4-6].

Работа выполнена в рамках государственного задания ИМ СО РАН (проект FWNF-2022-0008).

Список литературы:

1. Александров П.С. // Fund. Math, 1933, 20, 140-150.
2. Бабенко К.И. Основы численного анализа. М.; Ижевск: РХД, 2002.
3. Белых В.Н. // СМЖ. 2005. Т. 46. № 3. С. 483-499.
4. Белых В.Н. // ДАН. 2017. Т. 473. № 6. С. 650-654.
doi:10.7868/S0869565217120052
5. Белых В.Н. // ПМТФ. 2019. Т. 60. № 2. С. 226-237.
doi: 10.15372/PMTF20190219
6. Белых В.Н. // ЖВМ и МФ. 2020. Т. 60. № 4. С. 553-566.
doi: 10.31857/S0044466920040031

РАЗДЕЛЕНИЕ МАТРИЧНОГО СПЕКТРА ОТНОСИТЕЛЬНО КРИВОЙ В ПРИКЛАДНЫХ ЗАДАЧАХ

Э.А. Бибердорф^{1,2}

¹ИМ СО РАН, Новосибирск, biberdorf@ngs.ru

²НГУ, Новосибирск, e.biberdorf@g.nsu.ru

Многие прикладные задачи сводятся к спектральной проблеме. При этом зачастую практическое значение имеет информация о локализации групп собственных значений относительно некоторой кривой. Например, в задачах устойчивости нужно знать расположение спектра в областях устойчивости и неустойчивости, разделенных нейтральной кривой. Востребована также информация о чувствительности собственных значений к возмущению матрицы, с которой, например, связана так называемая "практическая" неустойчивость.

Эти данные можно получить при постановке и решении задачи дихотомии матричного спектра. Такой подход был предложен Годуновым С.К. в 80-х годах [1]. Под его руководством были разработаны эффективные алгоритмы для разделения матричных спектров относительно окружности и мнимой оси. Позднее были созданы алгоритмы для кривых второго порядка (см. обзор [2]), в последнее время - алгоритмы для ломаных линий (сектор, усеченный сектор, полуполоса, прямоугольник) и т.д.

Ранее данные алгоритмы применялись к изучению устойчивости решений обыкновенных дифференциальных уравнений [3]. Но после адаптации метода дихотомии к матрицам с большой нормой [4] стало возможно его использование для исследования спектров дифференциальных операторов. Возможности алгоритмов продемонстрированы при исследовании устойчивости плоско-параллельных течений вязкой и вязкоупругой несжимаемых жидкостей .

Работа выполнена в рамках государственного задания Института математики им. С.Л. Соболева СО РАН (проект № FWNF-2022-0008)

Список литературы:

1. Годунов С. К. Задача о дихотомии спектра матрицы // Сиб. мат. журн, 1986, т. 27. № 5. с. 24–37
2. Biberdorf E. Development of the matrix spectrum dichotomy method // Continuum mechanics, applied mathematics and scientific computing:

Godunov's legacy – A liber amicorum to Professor Godunov; Book series: Advanced Structured Materials, 2020, 37-40

3. Буньков В.Г., Годунов С.К., Курзин В.Б, Садкейн М. Применение нового математического аппарата "Одномерные спектральные портреты матриц" к решению проблемы аэроупругих колебаний решеток и лопастей // Ученые записки ЦАГИ, XL(6), 2009, 3–13.
4. Бибердорф Э.А., Блинова М.А., Попова Н.И. Модификации метода дихотомии матричного спектра и их применение к задачам устойчивости// СибЖВМ, 2018, Т. 21, № 2, с. 139-153

ПРЯМОЕ КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЯ ДАННЫХ ЭЛЕКТРОФИЗИОЛОГИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ

А.И. Бойко¹, М.Н. Устинин¹, С.Д. Рыкунов¹

¹ *ИМПБ РАН - филиал ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, Пущино,
a.boyko@list.ru*

Разработан комплекс программ для компьютерного моделирования многоканальных временных рядов, регистрируемых в различных экспериментах по изучению электромагнитных полей, порождаемых человеческим телом. В качестве моделей приборов могут быть использованы наборы координат и направлений магнитных энцефалографов нескольких типов, электроэнцефалографов и магнитных кардиографов. Программный комплекс обеспечивает: - интерактивное размещение источников поля в пространстве головы или тела; редактирование амплитудно-временной зависимости; - пакетную загрузку большого количества источников; -моделирование шумов; - моделирование малоканальных планарных магнитометров различных порядков, с заданием формы прибора, количества датчиков и их параметров. Для изучения мозга человека в качестве моделей головы используются магнитно-резонансные томограммы, для изучения сердца используется модель тела в виде полупространства с плоской границей. Источники размещаются в модельном пространстве, для них решается прямая задача в физической модели, соответствующей используемому прибору. Для каждого источника задается временная зависимость и вычисляется многоканальный временной ряд. Затем производится суммирование временных рядов от всех источников и добавляется шумовая компонента. Программа состоит из трех модулей: модуля ввода-вывода, расчетного модуля и модуля визуализации. Модуль ввода-вывода отвечает за загрузку моделей приборов, моделей головного мозга и параметров источников поля. Расчетный модуль

отвечает за непосредственный расчет поля и преобразование координат между индексной системой и системой головы. Модуль визуализации отвечает за изображение модели мозга, положения источников поля, графического представления амплитудно-временной зависимости источников поля и рассчитанных значений суммарного поля. Рассмотрены магнитные и электрические поля, производимые источниками в зонах мозга, ответственных за обработку речевых стимулов. Полученный многоканальный сигнал может использоваться для тестирования различных методов анализа данных и планирования экспериментов.

Список литературы:

1. Бойко А.И., Рыкунов С.Д., Устинин М.Н. Программный комплекс для моделирования данных электрофизиологической активности. // Математическая биология и биоинформатика. 2022; Т. 17 №1, С. 1-9 doi: 10.17537/2022.17.1.

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ СВЕРХЗВУКОВЫХ ВИХРЕЙ С ПОВЕРХНОСТЬЮ

В.Е. Борисов¹, Т.В. Константиновская², А.Е. Луцкий³

¹ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, narelen@gmail.com

²ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, konstantinovskaya.t.v@gmail.com

³ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, allutsky@yandex.ru

Концевым вихрям на сверхзвуковых режимах полета вплоть до настоящего времени было уделено значительно меньшее внимание, чем на дозвуковых режимах (см. [1] и приведенную там библиографию). Наименее изученным к настоящему времени остается вопрос о взаимодействии сверхзвуковых концевых вихрей с поверхностями, расположенными под небольшими углами к оси вихря. В представленной работе рассматривается сверхзвуковое обтекание тандема крыльев при $M_\infty = 3$ и $Re = 10^7$ в двух конфигурациях, отличающихся вертикальным расположением вихрегенератора так, чтобы сходящий с крыла-генератора концевой вихрь рассекался основным крылом и его большая часть обтекала крыло сверху (1) и снизу (2). Для описания трехмерных турбулентных течений сжимаемого газа используется система нестационарных осредненных по Рейнольдсу и Фавру уравнений Навье–Стокса (URANS). Турбулентная вязкость определяется согласно модели турбулентности

SA. Для идентификации вихревых структур в потоке применяется Лютекс-критерий (Liutex) [2]. Установлено, что сначала концевой вихрь рассекается крылом на 2 вихря с одинаковым направлением вращения. Далее вниз по потоку происходит формирование вторичных вихрей. В рассмотренных режимах наблюдается 5-6 вторичных вихрей. При этом несколько вторичных вихрей имеют направление вращения, противоположное вращению основного вихря. Вторичные вихри достаточно быстро диссипируют. На расстоянии 5 хорд от задней кромки отчетливо наблюдается только 1 основной вихрь. Работа поддержана проектом РНФ № 22-21-00470.

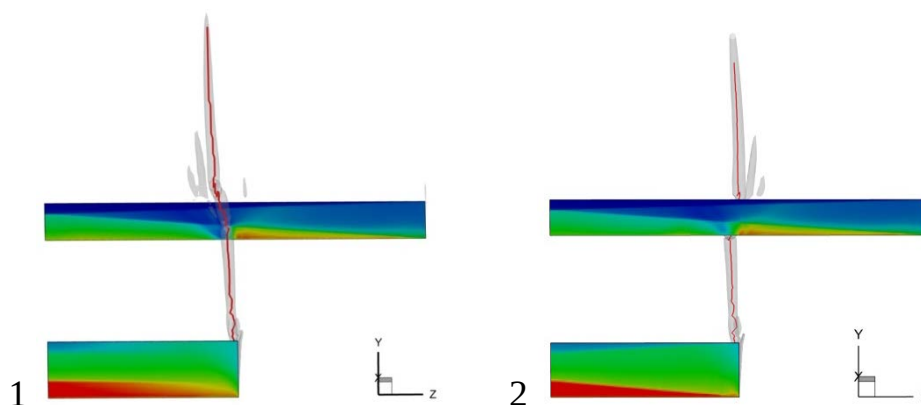


Рис.1. Сверхзвуковой концевой вихрь в тандеме крыльев

Список литературы:

1. Borisov A.E. et al // AIP Conf. Proc. 2018 2027:030120.
2. Lui C. et al // J. Hydrodyn. 2019 31(2) С. 205–223.

SOLVING LARGE LINEAR SYSTEMS OF SECOND ORDER DIFFERENTIAL EQUATIONS BY KRYLOV SUBSPACES: RESIDUAL AND RESTARTING

M.A. Botchev¹, L.A. Knizhnerman², M. Schweitzer³

¹*Keldysh Institute of Applied Mathematics RAS and Marchuk Institute of Numerical Mathematics RAS, Moscow, Russia, botchev@kiam.ru*

²*Marchuk Institute of Numerical Mathematics RAS, Moscow, Russia, lknizhnerman@gmail.com*

³*Bergische Universität Wuppertal, Wuppertal, Germany, marcel@uni-wuppertal.de*

Exponential time integration methods for linear systems of second order differential equations typically involve the so-called ψ and σ matrix

functions [1]. This is comparable to first order differential equation systems, for which exponential time integration methods are based on the matrix exponential and similar matrix functions. If systems to be solved are large then actions of these matrix functions on vectors are often evaluated by Krylov subspace methods [1]. In this work we propose a residual notion for approximate computation of the ψ and σ matrix function actions. The residuals can be easily computed within the framework of Krylov subspace methods. We analyze convergence of the residual using the Faber and Chebyshev polynomial technique.

For efficiency, Krylov subspace dimension in Krylov subspace methods has to be kept moderate. One way to do so is restarting. We develop a restarting for Krylov subspace evaluation of the ψ and σ matrix functions, which is based on the introduced residual concept and is called residual-time (RT) restarting. This extends an earlier work, where the RT restarting for the matrix exponential and similar matrix functions is proposed [2,3]. As presented numerical experiments suggest, the RT restarting leads to efficient time integration schemes. Furthermore, we show that an additional gain in efficiency can be obtained by combining our RT restarting with the Gautschi cosine scheme.

Work of M.A.—Botchev is supported by the Russian Science Foundation grant No. 19-11-00338. Work of L.A. Knizhnerman is supported by the Moscow Center of Fundamental and Applied Mathematics at INM RAS (Agreement No.075-15-2022-286 with the Ministry of Education and Science of the Russian Federation).

References:

3. Hochbruck M., Osterman A. // *Acta Numerica* 2010, Vol.19. – pp. 209-286.
4. Botchev M.A., Knizhnerman L.A. // *J. Comput. Appl. Math.* 2020, Vol.364. – pp. 112311.
5. Botchev M.A., Knizhnerman, L., Tyrtshnikov, E.E. // *SIAM J. Sci. Comput.* 2021, Vol.43, no. 6, A3733–A3759.

ЧИСЛЕННЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ УСТОЙЧИВОСТИ РАВНОВЕСИЯ В МАГНИТНЫХ ЛОВУШКАХ ДЛЯ УДЕРЖАНИЯ ПЛАЗМЫ

К.В. Брушлинский^{1,2,3}, В.В. Крюченков^{2,4}, Е.В. Степин^{1,2,5}

¹*Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН*

²*Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»*

³*brush@keldysh.ru, ⁴kruichenkov.viacheslav@mail.ru,*

⁵*eugene.v.stepin@gmail.com*

Равновесные конфигурации сжатой и нагретой плазмы, удерживаемые магнитным полем в специальных ловушках, представляют постоянный интерес в современных работах по физике плазмы в связи с перспективами практической реализации управляемого термоядерного синтеза. Одним из основных в этой области исследований является вопрос об устойчивости конфигураций. В докладе представлены математические модели ловушек с погружёнными в плазму токонесущими проводниками, предложенными А.И. Морозовыми и названными им «галатеями», и рассмотрены некоторые подходы к исследованию устойчивости равновесия возможных конфигураций в них. Математический аппарат моделей – уравнения магнитной газодинамики (МГД). Равновесные конфигурации, допускающие симметрию, описываются краевыми задачами с полулинейным эллиптическим уравнением Грэда-Шафранова, численно решаемыми итерационным методом установления. Устойчивость определяется поведением во времени решений нестационарных задач с линеаризованными МГД-уравнениями. Численному исследованию двумерных задач в ловушке галатее-поясе с двумя токонесущими проводниками предшествуют упрощённые подходы, позволяющие обратить внимание на обстоятельства, способствующие влиять на устойчивость или её потерю. Один из таких подходов – количественные критерии сходимости установления равновесия. Другой – исследование устойчивости одномерных конфигураций кольцевой формы, окружающих один прямой проводник с током, которые следует рассматривать как типичный общий элемент любой ловушки-галатеи.

В расчётах получены результаты, относящиеся к двумерным конфигурациям в «Поясе» и их упрощённым вариантам. Постановка задач и некоторые численные результаты опубликованы в статьях [1–4].

Список литературы:

1. Брушлинский К.В., Кривцов С.А., Степин Е.В. // ЖВМиМФ. 2020. Т. 60. № 4. С. 700-710.
2. Брушлинский К.В., Степин Е.В. // Дифф. ур. 2020. Т. 56. № 7. С. 901-909.
3. Брушлинский К.В., Степин Е.В. // Дифф. ур. 2021. Т. 57. № 7. С. 867-879.
4. Брушлинский К.В., Степин Е.В. // Дифф. ур. 2022. Т. 58. № 8 [в печати]

МОДЕЛИРОВАНИЕ СИСТЕМЫ AG/AU НАНОКЛАСТЕРОВ

Д.Н. Бухаров

ВлГУ, buharovdn@gmail.com

Системы нанокластеров благородных металлов, например, комплексы из золотых и серебряных наночастиц на твердой подложке актуальны в сфере разработок инновационных материалов для нужд современной наноэлектроники [1]. Эта актуальность обусловлена возможности управлять их свойствами через предварительное определение их структуры, которое может быть выполнено с помощью моделирования

Одним из удобных методов синтеза таких структур является термодиффузионное осаждение из коллоидного раствора на стеклянную подложку, с использованием сканирования лазерным пучком с заданным диаметром (d), скоростью перемещения (v) и мощностью (p), и числом проходов по подложке (N) [2]. Системы Ag/Au нанокластеров полученные таким методом могут быть смоделированы в рамках модели диффузионно-ограниченной агрегации(DLA) [3]. Основной параметр, оказывающий влияние на структуру модели нанокластера – вероятность прилипания (s). Она определяет нормированный коэффициент поверхностного натяжения раствора около подложки. На рис. 1 приведено изображение системы Ag/Au нанокластеров (рис.1а), полученное указанным выше методом и ее DLA модель (рис.2б). Основным критериям оценки адекватности выбиралась разница фрактальных размерностей. Она была порядка 10^3 , что говорит об адекватности модели. Таким образом, предложенная модель может быть применима для описания образцов систем Ag/Au нанокластеров.

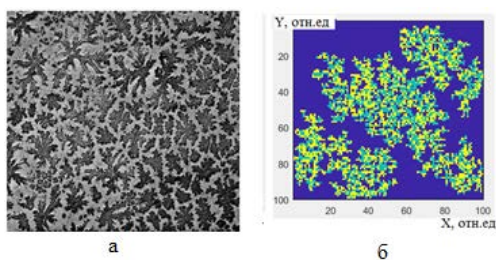


Рис.1. Система Ag/Au нанокластеров: экспериментальный образец при $p=2.5$ Вт, $v=1.2$ мм/с, $N=10$ (а), DLA модель при $s(t)=1/N(t)$

Список литературы:

1. Afzal Shah, Latif-ur-Rahman, Rumana Qureshi, Zia-ur-Rehman // Rev. Adv. Matter. Sci 2012 №30 PP. 133-149.
2. Аракелян С.М., Худаберганов Т.А., Истратов А.В., Осипов А.В., Хорьков К.С. // Оптика и спектроскопия 2019 Т. 127 Вып. 1 С. 125-135.
3. Mroczka J., Woźniak M., Onofri F.R.A. // Metrol. Meas. Syst 2012 № 3 PP. 459-470.

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ В ИССЛЕДОВАНИЯХ СТРУКТУРНЫХ И ФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ МОДИФИЦИРОВАННОГО ГИДРОКСИАПАТИТА

**В.С. Быстров¹, Е.В. Парамонова¹, И.В. Лихачев¹, Л.А.
Авакян², Н.В. Булина³**

¹*ИМПБ РАН — филиал ФИЦ ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, 142290
Пушино, Россия, vsbys@mail.ru*

²*Физический факультет, Южный Федеральный университет, Ростов-
на-Дону, 344090, Россия*

³*Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН,
Новосибирск, 630128, Россия*

Гидроксиапатит (ГАП) широко используемый материал для различных медицинских применений, благодаря его естественной биосовместимости с костными и другими тканями организма человека, как основной минеральный компонент костей и зубов [1]. В настоящее время ГАП используют и в других целях, например, в качестве катализатора в фото-катализе, как адсорбента и носителя доставки лекарств и др. Проведенные ранее исследования, моделирование и

расчеты структуры и свойств ГАП показало, что многие из его свойств определяются наличием различных структурных дефектов (вакансий кислорода и гидроксильных групп, внедрений и замещений ионов различных атомов и атомных групп в структуре ГАП) [1, 3-5]. Такие модификации расширяют возможности применения ГАП.

Для правильного предсказания структурных и физических свойств ГАП в различных модификациях необходимы все более точные и корректные расчеты и применение все более развитых численных методов. Квантовомеханическое моделирование и расчеты сложных атомно-молекулярных систем имеют свои ограничения, т.к. невозможно получить точные решения квантово-механических уравнений и здесь применяются различные приближения, дающие разные уровни точности. Для моделей периодических структур используется теория функционала плотности (ТФП), которая постоянно развивается: улучшаются ее приближения (от приближения локальной плотности LDA к приближению обобщенного градиента GGA); применяются все более корректные гибридные функционалы и их комбинации [1-3, 5, 6]; улучшаются и программные средства (от AIMPRO до VASP, Quantum ESPRESSO). При этом здесь используются комбинированные подходы, сочетающие методы ТФП, с квантовыми расчетами ограниченных атомных кластеров полуэмпирическими методами, которые также постоянно улучшаются (от методов AM1, PM3 до PM6, PM7 и PM10 в MOPAC и др.) [1-3].

В данной работе моделирование и расчеты свойств модифицированного ГАП, изменяющихся при замещении атомов Са другими атомами, проводятся методами ТФП [1, 3, 5, 6] в различных приближениях. Изучены изменения структурных, механических и упругих свойств при различных замещениях: рассчитаны постоянные решетки, значения упругих, электронных и оптических характеристик; методами молекулярной динамики дана оценки отжига структуры ГАП при повышении температуры. Исследование оптических и пьезоэлектрических свойств ГАП проводятся ТФП методами в комбинации с квантовыми полуэмпирическими методами PM3 и PM7, PM6-D3H4; рассчитаны изменения ширины запрещенной зоны и пьезоэлектрических коэффициентов ГАП при ряде замещений. Полученные результаты анализируются в сравнении с данными [1, 2, 4]. Результаты моделирования позволяют оценить влияние замещений атомов Са в ГАП на изменения его оптических, механических, пьезоэлектрических свойств и улучшить его биосовместимость.

Работа поддержана грантом Российского научного фонда (РНФ) № 21-12-00251.

Список литературы:

1. V. Bystrov, E. Paramonova, L. Avakyan, J. Coutinho, N. Bulina. // Nanomaterials 2021, V. 11, 2752.
2. V.S. Bystrov, J. Coutinho, et al. // J. Phys. D: Appl. Phys. 2015, V. 48, 195302.
3. L. Avakyan, E. Paramonova, V. Bystrov et al. // Nanomaterials, V. 11, 2978.
4. N.V. Bulina, S.V. Makarova, S.G. Baev, et al. // Minerals 2021, V. 11, 1310.
5. L.A. Avakyan, E.V. Paramonova, J. Coutinho, et al. // J. Chem. Phys. 2018, V. 148, 154706.
6. V. S. Bystrov, L. A. Avakyan, E. V. Paramonova, José Coutinho. // J. Chem. Phys. C 2019, V. 123, 4856.

АНАЛИТИЧЕСКИЙ ПЕРВЫЙ ИНТЕГРАЛ С ФРАКТАЛЬНОЙ ЕСТЕСТВЕННОЙ ГРАНИЦЕЙ

В.П. Варин

ИПМ им. М.В.Келдыша РАН, varin@keldysh.ru

Итерации аналитического отображения (или формального степенного ряда) удовлетворяют очевидному полугрупповому свойству. Классическая задача о *непрерывной итерации* (НИ) состоит в обобщении этого свойства на произвольные комплексные числа. Эта задача обычно рассматривается как чисто комбинаторная. Она решается с помощью бесконечных матриц Жаботинского и экспоненциальных полиномов Белла. Мы нашли элементарное решение этой задачи.

Формальные ряды НИ обычно расходятся, хотя отдельные доказательства этого факта весьма нетривиальны.

Итерации аналитического отображения можно рассматривать как дискретную динамическую систему (ДДС). Тогда построение НИ можно рассматривать как восстановление непрерывной динамической системы (НДС) по ее дискретной редукции (отображение Пуанкаре), а формальные ряды НИ представляют инвариантные кривые ДДС.

Существование аналитических инвариантных кривых в ДДС эквивалентно существованию дополнительного аналитического интеграла в НДС. Эти кривые в НДС обычно вычисляются в виде расходящихся рядов. Поэтому многие математики полагали, что они «не существуют», не говоря уже об их аналитичности.

НИ дает примеры НДС, инвариантные кривые которых почти всегда выражаются расходящимися рядами, но в то же время являются аналитическими. Справедлива

Теорема. Для любого формального ряда $F(y)=y+\dots$ существует аналитический первый интеграл $H(x,y)$, линии уровня которого являются инвариантными кривыми непрерывной итерации для достаточно малых y .

Например, для логистического отображения $y \rightarrow y-y^2$ первый интеграл НИ вычисляется, в определенном смысле, в явном виде, и выражается с помощью аналитической функции, голоморфной внутри множества Жюлиа логистического отображения, т.е. внутри области с фрактальной границей.

Таким образом, НДС может быть интегрируемой в конечной области, а хаос (т.е. неинтегрируемость) быть свойством аналитической функции, выражающей интеграл задачи.

Список литературы:

1. Варин В.П. Об интерполяции некоторых рекуррентных последовательностей. (2021). Ж. вычисл. матем. и матем. физ. Т. 61. N 6. с. 913-925.
2. Варин В.П. Инвариантные кривые некоторых дискретных динамических систем (2022). Ж. вычисл. матем. и матем. физ. Т. 62. N 2. с. 199-216.

УРАВНЕНИЕ ВЛАСОВА-ЭЙНШТЕЙНА И ТОЧКИ ЛАГРАНЖА

В.В.Веденяпин¹, А.Г.Петров².

¹ФИЦ Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН,
vicveden@yahoo.com

²Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского РАН,
petrovipmech@gmail.com

В классических работах (см., например, [1]) уравнения для полей предлагаются без вывода правых частей. Здесь мы даем вывод правых частей уравнений Максвелла и Эйнштейна в рамках уравнений Власова-Максвелла-Эйнштейна из классического принципа наименьшего действия[2-6] а также их гидродинамических и Гамильтон-Якобиевых следствий. Ускоренное расширение Вселенной,

отмеченное Нобелевской премией по физике в 2011 году, вызывает пристальное внимание. Общепринятым объяснением сейчас является добавление лямбда-члена Эйнштейна в релятивистское действие. И хорошо известно, что в нерелятивистской теории это соответствует добавлению отталкивающего квадратичного потенциала [2-4, 6]. Мы изучаем решение типа Фридмана [2-4] (модель Милна-Маккри) и точки Лагранжа с таким потенциалом [4].

Список литературы:

1. В.А. Фок. Теория пространства, времени и тяготения. М.: ЛКИ, 2007.
2. В.В. Веденяпин, М.Ю. Воронина, А.А. Руссков. О выводе уравнений электродинамики и гравитации из принципа наименьшего действия // Доклады РАН, 2020, том 495, с. 9–13.
3. V.V. Vedenyapin, N.N. Fimin, V.M. Chechetkin, The generalized Friedman model as a self-similar solution of Vlasov–Poisson equations system // European Physical Journal Plus, 136, No 670 (2021).
4. В.В.Веденяпин, В.И.Паренкина, А.Г.Петров, Чжан Хаочэнь. Уравнение Власова-Эйнштейна и точки Лагранжа // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2022. № 23, 23с.
5. В.В. Веденяпин, М.А. Негматов. О выводе и классификации уравнений типа Власова и МГД. Тождество Лагранжа и форма Годунова // Теоретическая и математическая физика. - 2012. Т. 170. № 3. С. 468–480.
6. В. В. Веденяпин, В.И.Парёнкина, С.Р.Свирщевский. О выводе уравнений электродинамики и гравитации из принципа наименьшего действия, ЖВМ и МФ, 2022, т.62, № 6, с. 146-150.

МОДЕЛИРОВАНИЕ КОНТАКТНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ТЕЛ НА НЕСОГЛАСОВАННЫХ СЕТКАХ С ПОМОЩЬЮ МЕТОДА ДЕКОМПОЗИЦИИ ОБЛАСТИ

М.П. Галанин^{1,2}, А.С. Родин^{1,2}

¹*Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН,*

²*Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана, galan@keldysh.ru, rals@bk.ru*

При решении задач механики твердого деформируемого тела часто необходимо учитывать контактное взаимодействие различных частей рассматриваемой конструкции. Контактная задача подразумевает выполнение ряда дополнительных граничных условий

на участках тел, которые контактируют друг с другом. При этом конфигурация контактирующих поверхностей и их положение могут меняться под действием приложенных нагрузок, их итоговые значения заранее неизвестны. Поэтому в общем случае контактная задача всегда является нелинейной и ее решение ищется в рамках некоторого численного итерационного процесса. Наиболее популярными численными методами решения контактных задач являются метод штрафных функций и метод множителей Лагранжа [1]. В данных методах после пространственной дискретизации задачи (обычно для этого используется метод конечных элементов) в рамках одной итерации для зафиксированной конфигурации контактных поверхностей получается одна общая система линейных уравнений для всей конструкции. В качестве альтернативных алгоритмов можно использовать методы, относящиеся к классу методов декомпозиции области (МДО) [2]. Главным преимуществом данных методов является возможность в рамках одной итерации решать системы линейных уравнений для каждого тела по отдельности. В докладе представлен алгоритм на основе метода Нейман-Дирихле (вариант МДО) [1,2], для решения задачи контакта системы термоупругих тел. Особое внимание уделено случаю, когда сетки на поверхностях являются несогласованными, что вызывает дополнительные трудности при расчете контактных сил. Для демонстрации корректности предложенного алгоритма рассмотрен ряд многомерных задач. Некоторые задачи решены в двух постановках: осесимметричной и трехмерной, выполнено сравнение полученных результатов.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-21-00260, <https://rscf.ru/project/22-21-00260/>.

Список литературы:

1. Wriggers P. Computational Contact Mechanics. Berlin-Heidelberg: Springer-Verlag, 2006. 520 p.
2. Toselli A., Widlund O. Domain Decomposition methods – Algorithms and Theory. Berlin-Heidelberg: Springer-Verlag, 2005. 450 p.

АНАЛИТИЧЕСКИЕ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ ГИДРОДИНАМИКИ, СВЯЗАННЫЕ С НЕФТЕГАЗОВОЙ ОТРАСЛЮ

В.А. Галкин^{1,2}, А.О. Дубовик^{1,2}

¹Сургутский филиал ФГУ ФНЦ НИИСИ РАН,

²Сургутский государственный университет

e-mail: val-gal@yandex.ru, alldubovik@gmail.com

Рассмотрение ниже представленных классов точных решений связано с вопросом построения kernового симулятора и описывает динамику жидкости в пористой среде [1]. Простейшая модель пористой среды содержит дискретный набор точек – узлы сетки ∂D . Тогда областью течения жидкости является $D \equiv \mathbb{R}^n \setminus \partial D$. Система уравнений гидродинамики, описывающая течение вязкой жидкости в области $\{x_1, x_2, x_3\} \in D, t > 0$:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\frac{1}{\rho_0} \nabla p + \mu \Delta \mathbf{u}, \operatorname{div} \mathbf{u} = 0, \mathbf{u}|_{\partial D} = 0. \quad (1)$$

Пусть область течения D имеет периодическую структуру и представляет собой сетку, состоящую из кубов с ребром длиной 2π . Если начальное условие имеет вид

$$\mathbf{u}|_{t=0} = \left\{ \exp(\lambda(x_3 - \varphi(0))) \sin x_2; \exp(-\lambda(x_3 - \varphi(0))) \sin x_1; \varphi'(0) \right\},$$

где λ – произвольный параметр, то точное решение задачи (1), имеет вид [2]

$$\mathbf{u} = \left\{ \exp((\lambda^2 - 1)\mu t) \exp(\lambda(x_3 - \varphi(t))) \sin x_2; \right. \\ \left. \exp((\lambda^2 - 1)\mu t) \exp(-\lambda(x_3 - \varphi(t))) \sin x_1; \varphi'(t) \right\},$$

$$p = \exp(2(\lambda^2 - 1)\mu t) \cos x_1 \cos x_2 - \varphi''(t) x_3,$$

где $\varphi(t)$ – произвольная функция времени. В этом случае границей области течения ∂D являются точки $(x_1, x_2) = \pi \vec{n}$, $\vec{n} = (k, l) \in \mathbb{Z}^2$.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (коды проектов 20-07-00236, 20-04-60123).

Список литературы:

1. Бетелин В.Б., Галкин В.А., Дубовик А.О. Точные решения системы Навье-Стокса для несжимаемой жидкости в случае задач, связанных

- с нефтегазовой отраслью // Доклады Академии Наук. Математика, информатика, процессы управления. 2020. Т. 495. № 1. С. 13–16. DOI: 10.31857/S2686954320060053.
2. Galkin V. A., Dubovik A.O. Visualization of flows of a viscous conductive liquid with the presence of impurities in the flow field corresponding to exact solutions of the MHD equations // Scientific Visualization. 2021. V. 13. Num. 1. p. 104 – 123, DOI: 10.26583/sv.13.1.08

ЧИСЛЕННЫЙ МЕТОД РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ О ФАЗОВОМ ПЕРЕХОДЕ В МНОГОКОМПОНЕНТНОМ РАСТВОРЕ.

А.О. Гусев¹, О.В. Щерица², О.С. Мажорова³

¹ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, aogus@mail.ru

²ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, shchery@keldysh.ru

³ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, olgamazhor@mail.ru

Рассмотрена самосогласованная модель процесса кристаллизации многокомпонентного раствора. Основой математической модели являются уравнения Навье – Стокса, уравнения тепломассопереноса в твердой и жидкой фазах и условия термодинамического равновесия на границе раздела фаз. Предложена вычислительная схема, в которой на разностном уровне выполнены законы сохранения кинетической и внутренней энергии, балансы массы каждого из компонентов [1]. Выделен класс консервативных разностных схем, для которых метод выпрямления фронта и метод, основанный на использовании подвижных сеток, алгебраически эквивалентны [2]. Дискретные уравнения, описывающие распределение температуры в области, состав твердой и жидкой фаз, и положение фронта кристаллизации, решаются совместно [3]. Предложенная вычислительная процедура является надежным инструментом исследования процессов кристаллизации и позволяет моделировать рост и растворение многокомпонентных соединений в широком диапазоне физических параметров.

Список литературы:

3. Gusev A.O., Shcheritsa O.V., Mazhorova O.S. Conservative finite volume strategy for investigation of solution crystal growth techniques. // Computers and Fluids, 202, (2020), p. 104501.
4. Гусев А.О., Щерица О.В., Мажорова О.С. К вопросу об эквивалентности разностных методов решения задачи Стефана на подвижных и фиксированных сетках // Дифференциальные уравнения. 2021. т. 57. №7. с. 907-921.

5. Гусев А.О., Щерица О.В., Мажорова О.С. Анализ устойчивости методов решения задачи о фазовом переходе // Дифференциальные уравнения. 2019. Т. 55. №7. с. 962–972.

ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛАСТИЧЕСКОЙ ТУРБУЛЕНТНОСТИ В ОГРАНИЧЕННОЙ ДВУМЕРНОЙ ЯЧЕЙКЕ

В.В. Денисенко¹, С.В. Фортова¹

¹ *Институт автоматизации проектирования РАН, Москва*
e-mail: ned13@rambler.ru

Целью работы является численное исследование феномена упругой турбулентности в двумерной ограниченной области (квадратной ячейке). Возникновение и развитие турбулентного режима изучается на примере течения Колмогоровского типа. Методами прямого численного моделирования течения вязкоупругой среды при очень малых числах Рейнольдса обнаруживается, что при определенных условиях течение переходит в так называемый упругий турбулентный режим[1,2]. В работе численно исследовано влияние концентрации полимерных молекул An на характеристики течения. Увеличение An приводит к тому, что течение становится более неустойчивым. Также исследовано влияние одного из важных параметров задачи - числа Вайсенберга Wi на устойчивость течения и формирования турбулентного режима.

Система уравнений решалась гибридным методом – ее гидродинамическая часть аппроксимировалась простейшей линеаризацией Годунова [3], а система, описывающая эволюцию поля вектора растяжений полимерных молекул – конечно-разностным методом. Для повышения устойчивости численной методики в правую часть системы уравнений эволюции поля растяжений полимеров $\bar{R}$ был добавлен диффузионный член $C_d \Delta R^i$.

Список литературы:

1. S. Berti, A. Bistagnino, G. Boffetta, A. Celani, and S. Musacchio. Two-dimensional elastic turbulence. // Phys. Rev. E, 77, 055306(R), 2008.
2. S. Berti and G. Boffetta. Elastic waves and transition to elastic turbulence in a two-dimensional viscoelastic Kolmogorov flow. // Phys. Rev. E, 82, 036314, 2010.

3. Godunov, S. and Denisenko, V. and Klyuchinskiy, Dmitriy and Fortova, S. and Shepelev, Vadim. (2020). Study of Entropy Properties of a Linearized Version of Godunov's Method. Computational Mathematics and Mathematical Physics. 60. 628-640. 10.1134/S0965542520040089.

О СТАЦИОНАРНЫХ НЕРАВНОВЕСНЫХ СОСТОЯНИЯХ В СИСТЕМЕ «ПОЛЕ-КРИСТАЛЛ»

Т.В. Дудникова

ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, tdudnikov@mail.ru

В докладе обсуждается существование ненулевого стационарного потока энергии в линейных гамильтоновых системах. В качестве модели рассматривается система, состоящая из поля Клейна–Гордона и бесконечного гармонического кристалла, и изучается задача Коши для нее. Предполагается, что начальные данные задачи являются случайной функцией, и изучается поведение распределений решения μ_t в моменты времени $t \in \mathbb{R}$. Доказывается, что корреляционные функции мер μ_t сходятся к пределу при больших временах. Получены явные формулы для предельных корреляционных функций в терминах начальной ковариации. Кроме того, доказана слабая сходимости мер μ_t к некоторой предельной гауссовой мере μ_∞ при $t \rightarrow \infty$ [1]. Эти результаты применяются к случаю, когда в начальный момент времени случайное решение в "левой" и "правой" частях пространства имеет гиббсовское распределение с различными температурами. В этом случае мы находим стационарные состояния системы, в которых предельная плотность потока энергии не обращается в нуль. Таким образом, для изучаемой системы построен класс стационарных неравновесных состояний. Сходимость мер μ_t была доказана ранее в [2] в частном случае, когда начальные меры μ_0 являются трансляционно-инвариантными относительно сдвигов по решетке. Аналогичные результаты были получены для поля Клейна–Гордона в [3, 4] и для гармонического кристалла в [5, 6].

Список литературы:

1. Дудникова Т.В. // сдано в печать в Доклады РАН. 2022.
2. Dudnikova T.V., Komech A.I. // Rus. J. Math. Phys. 2005. V. 12, № 3. P. 301–325.
3. Дудникова Т.В., Комеч А.И. // Теор. вероятн. и ее примен. 2006. V. 50, № 4. С. 582–611.

4. Дудникова Т.В. // Изв. РАН. Сер. матем. 2021. Т. 85. № 5. С. 110–131.
5. Dudnikova T., Komech A., Mauser N. // J. Stat. Phys. 2004. V. 114. P. 1035–1083.
6. Dudnikova T.V. // Rus. J. Math. Phys. 2019. V. 26. № 4. P. 429–453.

О РАСЧЕТЕ НЕСТАЦИОНАРНЫХ МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ ТЕЧЕНИЙ С УЧЕТОМ СОПРЯЖЕННОГО ТЕПЛООБМЕНА

В.Т. Жуков¹, Н.Д. Новикова², О.Б. Феодоритова³

ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, Москва

¹zhukov@kiam.ru, ²nn@kiam.ru, ³feodor@kiam.ru

В работе рассматривается нестационарная модель многокомпонентных течений с учетом теплообмена с твердыми непроницаемыми оболочками. В качестве оболочек могут выступать элементы летательного аппарата, стенки камеры сгорания двигателя и т.п. Газодинамическая модель основана на системе уравнений Навье-Стокса с введением уравнений для описания диффузии компонентов, а в твердом теле записывается нестационарное уравнение теплопроводности для температуры [1]. На интерфейсных границах «твердое тело – газ» ставятся условия сопряжения в виде отсутствия скачка температуры и теплового потока. В каждом блоке «твердое тело», «газ» строится неструктурированная сетка, согласованная по границам блоков. Многоблочная структура может быть достаточно произвольной. Разностная схема является конечно-объемной с дуальными ячейками консервативности, ассоциированными с узлами сетки. Развиваемая нами численная методика является функциональным расширением кода [2]. Схема интегрирования по времени основана на расщеплении определяющей системы уравнений на конвективный и диффузионный этапы. Это позволяет интегрировать по времени уравнение энергии в газовой и твердотельных областях как единое уравнение с автоматической аппроксимацией условий непрерывности температуры и теплового потока. В демонстрационных расчетах мы проверяем выполнение этих условий, оценивая разность односторонних тепловых потоков на интерфейсах.

Список литературы:

1. O.B. Feodoritova, M.M. Krasnov and V.T. Zhukov. A Numerical Method for Conjugate Heat Transfer Problems in Multicomponent Flows. //J. Phys.: Conf. Ser., 2021. Vol. 2028 012024.
2. Параллельный программный комплекс NOISEtte для крупномасштабных расчетов задач аэродинамики и аэроакустики / И.В. Абалакин, П.А. Бахвалов, А.В. Горобец [и др.] // Вычисл. методы и программирование. 2012. Т. 13. С. 110–125.

РАСЧЁТ КОЭФФИЦИЕНТОВ ОПЕРАТОРА ПРОЗРАЧНЫХ ГРАНИЧНЫХ УСЛОВИЙ ДЛЯ ВОЛНОВОГО УРАВНЕНИЯ В КРУГЛОМ КАНАЛЕ

Н.А. Зайцев¹

¹*ИИМ им. М.В. Келдыша РАН, nikolai_zaitsev@mail.ru*

Предложен метод вычисления коэффициентов оператора прозрачных граничных условий (ПГУ) для волнового уравнения в канале кругового сечения с граничными условиями третьего рода, однако метод может иметь более широкое применение. Этот метод не опирается на знание точного ядра свёртки граничного оператора в виде формулы. Метод предполагает только умение вычислять элементы матрицы Пуанкаре-Стеклова, связывающей значения производной по нормали к границе и самого решения в пространстве образов преобразования Лапласа, для отдельных значений двойственной переменной. Это позволяет использовать метод в более сложных случаях, в частности, для волнового уравнения с переменной скоростью звука.

Приведена таблица коэффициентов ядра свёртки, позволяющая рассчитывать ядро свёртки оператора ПГУ для всех гармоник, всех скоростей звука и всех радиусов канала с погрешностью, не превышающую 0.0001 для всех моментов времени от начального до бесконечности.

Проведена оптимизация параметров процедуры вычисления коэффициентов оператора ПГУ, исследована связь точности аппроксимации образа ядра свёртки и получаемой точности оригинала этого ядра для задачи в волноводе. Такая связь помогает оценить необходимую точность аппроксимации образа ядра в случаях, когда точное ядро свёртки неизвестно.

АНАЛИТИЧЕСКОЕ РЕШЕНИЕ И ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ ДЛЯ МОДЕЛИ «ХИЩНИК-ЖЕРТВА» НА НЕОДНОРОДНОМ АРЕАЛЕ

П.А. Зеленчук, В.Г. Цибулин

Южный федеральный университет, zelenchuk@sfnedu.ru

Найдено аналитическое решение для системы нелинейных уравнений реакция–диффузия–адвекция, описывающей динамику системы «хищник-жертва» на неоднородном кольцевом ареале. Модель учитывает пространственное распределение видов вдоль ареала, вызванное диффузией и направленной миграцией [1]:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = (k_1 u' - u Q_1' + u Q_2')' + u \left[\eta_1 f_n(u) - \frac{\mu_1 v}{1 + C u} \right], \quad f_n(u) = u^n \left(1 - \frac{u}{p} \right),$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} = (k_2 v' - v Q_3')' + v \left[-\eta_2 + \frac{\mu_2 u}{1 + C u} \right].$$

Здесь $u(x, t), v(x, t)$ – плотности популяций жертвы и хищника соответственно, k_1, k_2 – коэффициенты диффузии, функции Q_j ($j = 1, 2, 3$) – определяют миграционные потоки. Трофическая функция (второе слагаемое в квадратных скобках) задается функциональным откликом Холлинга второго рода, коэффициенты η_i, μ_i ($i = 1, 2$) – отвечают за прирост и убыль видов. Неоднородность ареала определяется неравномерным распределением ресурса жертвы $p(x)$, входящим в функцию роста жертвы $f_n(u)$. В случае $Q_1 = \alpha_1 \ln p$, $Q_2 = \beta_1 \ln v$, $Q_3 = \beta_2 \ln u$ ($\alpha_1, \beta_1, \beta_2$ – коэффициенты таксиса) и при выполнении условий $k_1 = \alpha_1 - n\beta_1, k_2 = \beta_2/n$ система (1) имеет аналитическое решение, отвечающее сосуществованию видов:

$$u = \frac{\lambda p}{b - \lambda c}, \quad v_n = \frac{\lambda^n p^n b}{(b - \lambda c)^{n+1}} \left(1 - \frac{\lambda}{b - \lambda c} \right),$$

где $\lambda = \eta_2/\eta_1, b = \mu_2/\eta_1, c = C/p$. Показано, что решение (3) отвечает концепции идеального свободного распределения (ИСР) [2]. На основе метода смещенных сеток проведены численные эксперименты по изучению отклонения распределений видов от ИСР при изменении параметров k_i, α_i, β_i ($i = 1, 2$).

Список литературы:

1. Цибулин В.Г., Ха Т.Д., Зеленчук П.А. Нелинейная динамика системы хищник-жертва на неоднородном ареале и сценарии локального взаимодействия видов // Известия высших учебных заведений. Прикладная нелинейная динамика. 2021. Т. 29. № 5. С. 751-764.

2. Зеленчук П.А., Цибулин В.Г. Идеальное свободное распределение в модели «хищник-жертва» при многофакторном таксисе // Биофизика. 2021. Т. 66. № 3. С. 546-554.

О ПАРАБОЛИЧЕСКОМ И ГИПЕРБОЛИЧЕСКОМ 2-ГО ПОРЯДКА ВОЗМУЩЕНИЯХ ГИПЕРБОЛИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ 1-ГО ПОРЯДКА

А.А. Злотник^{1,2}

¹НИУ Высшая школа экономики, 109028, Покровский б-р, 11, Москва,

²ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, 125047 Москва, Миусская пл., 4

azlotnik@hse.ru, office@keldysh.ru

Доклад посвящен задачам Коши для n -мерной симметричной гиперболической системы уравнений 1-го порядка с переменными коэффициентами и ее сингулярных возмущений - сильно параболической и гиперболической 2-го порядка систем уравнений с малым параметром $\tau > 0$ при вторых производных по x и t . Возмущения со вторыми производными по x имеют дивергентный вид и содержат матрицы с переменными коэффициентами. Подобные возмущения много лет применяются на практике при построении сеточных методов решения квазилинейной системы уравнений газовой динамики [1,2].

Формулируются результаты о слабых и сильных решениях исходной системы и систем с возмущениями, в том числе равномерные по τ оценки слабых решений последних систем. Они дополняют известные, и при их выводе используются комбинации ряда известных методов. Для разностей r_τ решений исходной системы и систем с возмущениями выводятся оценки порядка $O(\tau^{\alpha/2})$, $0 < \alpha \leq 2$, в том числе в норме $C(0, T; L^2(R^n))$, при начальных данных w_0 и свободном члене f из соответствующих пространств Соболева и Никольского гладкости порядка α по x (для f также порядка $\alpha/2$ по t для гиперболического возмущения). При $\alpha = 1/2$ охватывается широкий класс разрывных функций w_0 , что важно для приложений. Приводятся также оценки производных любого порядка по x для решений всех рассматриваемых систем и разностей r_τ порядка $O(\tau^{\alpha/2})$, $0 < \alpha \leq 2$ в случае, когда коэффициенты систем не зависят от x .

Описывается приложение результатов к линеаризованным на постоянном решении системе уравнений газовой динамики и ее возмущениям - параболической и гиперболической 2-го порядка квазигазодинамическим системам уравнений [3,4].

Результаты получены совместно с Б.Н. Четверушкиным. Работа поддержана грантом РФФИ, проект 22-11-00126.

Список литературы:

1. Четверушкин Б.Н. Кинетические схемы и квазигазодинамическая система уравнений. М.: МАКС Пресс, 2004.
2. Четверушкин Б.Н. // Матем. моделирование. 2018. Т. 30. № 2. С. 81-98.
3. Злотник А.А., Четверушкин Б.Н. // ЖВМиМФ. 2008. Т. 48. № 3. С. 445-472.
4. Злотник А.А., Четверушкин Б.Н. // Дифф. уравн. 2020. Т. 56. № 7. С. 936-947.

**L^2 -ДИССИПАТИВНОСТЬ ЛИНЕАРИЗОВАННОЙ ЯВНОЙ
РАЗНОСТНОЙ СХЕМЫ НА РАЗНЕСЕННЫХ СЕТКАХ ДЛЯ
1D УРАВНЕНИЙ БАРОТРОПНОЙ ГАЗОВОЙ ДИНАМИКИ С
РЕГУЛЯРИЗАЦИЕЙ**

А.А. Злотник¹, Т.А. Ломоносов²

НИУ Высшая школа экономики, ¹ azlotnik@hse.ru, ² tmonosov@hse.ru

Большой теоретический и прикладной интерес представляют условия устойчивости численных методов решения задач газовой динамики, в том числе явных по времени. К таким относятся основанные на так называемых квазигазодинамической и квазигидродинамической (КГидД) регуляризациях явные методы с симметричной аппроксимацией по пространству на неразнесенных сетках, где основные искомые функции определены на общей сетке по пространству [1].

В [2] впервые была построена и успешно апробирована явная схема на разнесенных сетках с КГидД регуляризацией для 3D уравнений Навье-Стокса-Кана-Хилларда. Затем в [3] выведен критерий L^2 -диссипативности такой схемы, линеаризованной на постоянном решении, в случае 1D баротропных уравнений Эйлера и Навье-Стокса сжимаемого газа при фоновом числе Маха $M=0$.

В этом докладе анализируется явная двухслойная симметричная по пространству линеаризованная схема [2] для случая 1D баротропных систем уравнений движения газа. Представлены как необходимые условия, так и близкие к ним достаточные условия L^2 -диссипативности решений задачи Коши при произвольном фоновом числе Маха M . Для их вывода применяется спектральный подход и анализируются

матричные неравенства, содержащие символы симметричных матриц конвективных и регуляризующих слагаемых. Изучаются случаи с использованием как только искусственной, так и только физической вязкости. Дается сравнение со спектральным условием устойчивости фон Неймана при $M=0$. Результаты будут опубликованы в [4].

Численные эксперименты в работе выполнены в рамках Программы фундаментальных научных исследований НИУ ВШЭ в 2022 г.

Список литературы:

1. Елизарова Т.Г. Квазигазодинамические уравнения и методы расчета вязких течений. М.: Научный мир, 2007.
2. Balashov V., Zlotnik A. // J. Comput. Dynamics. 2020. V. 7. №2. P. 291-312.
3. Злотник А.А., Ломоносов Т.А. // Матем. моделир. 2021. Т. 33. №5. С. 16-34.
4. Злотник А.А., Ломоносов Т.А. // ЖВМиМФ. 2022. Т. 62 (принята к печати).

О СВОЙСТВАХ АГРЕГИРОВАННОЙ КВАЗИГАЗОДИНАМИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ УРАВНЕНИЙ ГОМОГЕННОЙ ГАЗОВОЙ СМЕСИ

А.А. Злотник^{1,2}, А.С. Федченко¹

¹НИУ Высшая школа экономики, 109028, Покровский б-р, 11, Москва, azlotnik@hse.ru, asfedchenko@yandex.ru

²ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, 125047 Москва, Миусская пл., 4,

Уравнения движений смесей вязкого сжимаемого газа и их численное решение представляют большой прикладной и теоретический интерес. Для однокомпонентного газа регуляризованные, или квазигазодинамические (КГД), системы уравнений и основанные на них численные методы построены в [1,2]. Некоторые их существенные математические свойства выведены в [3,4]. Для бинарных смесей газов, включая гомогенные смеси (с общей скоростью и температурой компонент), КГД системы уравнений рассмотрены в [2,5,6].

Данный доклад посвящен агрегированной КГД системе уравнений многокомпонентной гомогенной газовой смеси в отсутствие химических реакций. Подобные системы уравнений используются для

компьютерного моделирования течений смесей газов [2,6]. Для указанной КГД системы выведено уравнение баланса энтропии с неотрицательным производством энтропии при наличии потоков диффузии между компонентами смеси. Даны результаты о существовании, единственности и L^2 -диссипативности слабых решений начально-краевой задачи для системы, линеаризованной на постоянном решении. Установлена параболичность по Петровскому и локальная по времени классическая однозначная разрешимость задачи Коши для самой КГД системы. Подробнее эти результаты представлены в [7].

Работа поддержана грантом РНФ, проект 22-11-00126.

Список литературы:

1. Четверушкин Б.Н. Кинетические схемы и квазигазодинамическая система уравнений. М.: МАКС Пресс, 2004.
2. Елизарова Т.Г. Квазигазодинамические уравнения и методы расчета вязких течений. М.: Научный мир, 2007.
3. Злотник А.А., Четверушкин Б.Н. // ЖВМиМФ. 2008. Т.48. №3. С. 445-472.
4. Злотник А.А. // ДАН. 2010. Т. 431. №5. С. 605-609.
5. Елизарова Т.Г., Злотник А.А., Четверушкин Б.Н. // ДАН. 2014. Т. 459. №4. С. 395-399.
6. Елизарова Т.Г., Злотник А.А., Шильников Е.В. // ЖВМиМФ. 2019. Т. 59. №11 С. 1899-1914.
7. Злотник А.А., Федченко А.С. // ДАН. Матем., информ., проц. управл. 2021. Т. 501. № 1. С. 31-37.

ПОИСК ОПТИМАЛЬНОГО МЕТОДА ДЛЯ ДЕШИФРИРОВАНИЯ КАТАСТРОФИЧЕСКИХ ВЕТРОВАЛЬНЫХ НАРУШЕНИЙ В МАЛОНАРУШЕННЫХ ЛЕСАХ ПО ДИСТАНЦИОННЫМ ДАННЫМ

Н.В. Иванова¹, М.П. Шашков¹, А.В. Лебедев^{2,3}, В.Н. Шанин^{1,4}

¹ *Институт математических проблем биологии РАН – филиал ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, Пущино, Россия*

² *Российский государственный аграрный университет – МСХА имени К.А. Тимирязева, Москва, Россия*

³ *Государственный заповедник «Кологривский лес», Кологрив, Россия*

⁴ *Институт физико-химических и биологических проблем почвоведения РАН, Пущино, Россия*

В докладе обсуждаются преимущества и ограничения разных дистанционных методов для оценки повреждений в результате катастрофического ветровала. Объект исследования – «ядро» заповедника «Кологривский лес» (Костромская обл.), которое представляет собой участок малонарушенных южнотаежных лесов общей площадью 918 га, естественная динамика которых не прерывалась антропогенными воздействиями в последние 300–400 лет. В мае 2021 г. в «ядре» заповедника произошел массовый ветровал, в результате воздействия шквального ветра значительная часть старовозрастных ельников была полностью разрушена.

Для дешифрирования ветровальных повреждений в августе 2021 г. выполнена аэрофотосъемка при помощи квадрокоптера DJI Phantom 4. Построены фотограмметрическое облако точек, модель высот и ортофотоплан. Поврежденные участки детектированы автоматически по модели высот и вручную по ортофотоплану путем векторизации всех визуально различимых упавших деревьев. Оценка поврежденных площадей также выполнена на основе вегетационных индексов (NDVI, NDWA8a, PSRI, NDRREDI), рассчитанных по данным Sentinel-2.

Результаты исследования показали, что оценки ветровальных повреждений, полученные разными методами, существенно различаются и составляют от 37 до 53% от общей площади исследованного участка в 400 га. Выяснено, что оценка на основе индекса NDVI занижена, он чувствителен только к сильным повреждениям древостоя. Площади, оцененные на основе NDWA8a локально завышены из-за более грубого пространственного разрешения растровых изображений (20 м/пиксель против 10 м/пиксель у NDVI). Индексы PSRI и NDRREDI оказались непригодны для дешифрирования ветровальных повреждений. По модели высот выявлено большинство

поврежденных участков. Контуры, полученные разными методами, в целом соответствовали детектированным вручную скоплениям поваленных деревьев. Поскольку визуально невозможно определить упало ли дерево в результате массового ветровала или до него, данные ручной векторизации стволов нельзя использовать в качестве эталона для оценки результатов автоматического детектирования. Это особенно важно учитывать в исследованиях малонарушенных лесов, где в норме присутствуют упавшие деревья.

ОБ УСТОЙЧИВОСТИ СОЛИТОНОВ СИСТЕМЫ МАКСВЕЛЛА-ЛОРЕНЦА С ВРАЩЕНИЕМ

В.М.Имайкин¹

¹ГБОУ Школа № 179 г. Москвы, ivm61@mail.ru

Вопрос об устойчивости солитонов системы Максвелла-Лоренца с вращением [1,2,3] является довольно сложным и к настоящему времени изучен далеко не полностью. В случае редуцированной системы, когда электрическое поле нечетно, магнитное четно по пространственной переменной, а центр масс частицы неподвижен [1,2,3], имеется не окончательный результат [3], основанный только на энергетических соображениях. Он заключается в том, что солитон устойчив при возмущениях с равномерно компактным носителем. При этом речь идет о полях E, B , принадлежащих естественному энергетическому пространству $L^2 \oplus L^2$.

Однако, можно рассмотреть решения из более узкого пространства с весом, для которых определен магнитный момент $M = I\omega + \int x \wedge (E \wedge B) dx$, где ω - угловая скорость вращения частицы (в случае обычного энергетического пространства этот интеграл может расходиться). В этом случае картина устойчивости меняется. Устойчивым оказывается только солитон с нулевой угловой скоростью, а остальные солитоны неустойчивы.

Для доказательства рассматривается функционал энергии на поверхности постоянного магнитного момента в фазовом пространстве (известно, что вдоль решений как энергия, так и магнитный момент сохраняются). Солитон с данным магнитным моментом оказывается критической точкой функционала энергии. В окрестности солитона вычисляется квадратичная форма приращения энергии. Для ненулевого солитона она оказывается знаконеопределенной. Тем самым из каждого ненулевого солитона выходят как устойчивые, так и неустойчивые направления.

Список литературы:

1. Spohn H. Dynamics of Charged Particles and their Radiation Field // Cambridge University Press, 2004, 378 p.
2. Imaikin V., Komech A., Spohn H. Rotating charge coupled to the Maxwell field: scattering theory and adiabatic limit // Monatshefte fuer Mathematik 142 (2004) №1-2 P.143-156.
3. Imaykin V. Stability of solitons for a rotating charge with a fixed center of mass in the Maxwell field // Journal of Mathematical Sciences V.255 №5 P.653-663.

СИММЕТРИИ, ЗАКОНЫ СОХРАНЕНИЯ И ИНВАРИАНТНЫЕ СХЕМЫ ДЛЯ СИСТЕМ ГИДРОДИНАМИЧЕСКОГО ТИПА

Е.И. Капцов¹

¹*Технологический университет Суранари, Накхонратчасима, Таиланд,
evgkaptsov@math.sut.ac.th*

Обсуждаются недавние результаты по построению инвариантных конечно-разностных схем для различных уравнений механики сплошной среды. Инвариантные схемы сохраняют основные геометрические свойства соответствующих дифференциальных уравнений, симметрия таких схем является необходимым условием применения теоремы Нетер и получения разностных законов сохранения. Зачастую удобной оказывается запись уравнений в координатах Лагранжа: в этом случае для некоторых моделей может быть построен лагранжиан, тогда как в эйлеровом описании лагранжиан отсутствуют. Знание лагранжиана и симметрий уравнения позволяет получить законы сохранения с помощью теоремы Нётер. Кроме того, часто инвариантные конечно-разностные схемы могут быть построены на наиболее простой, равномерной ортогональной сетке, именно в координатах Лагранжа.

В качестве примеров рассматриваются одномерные уравнения мелкой воды, модифицированные уравнения мелкой воды, уравнения Грина-Нагди, уравнения магнитной гидродинамики в плоской и цилиндрической геометрии.

Работа поддержана грантом Российского научного фонда, проект №18-11-00238 П «Системы уравнений гидродинамического типа: симметрии, законы сохранения, инвариантные разностные схемы».

Список литературы:

1. Dorodnitsyn V.A., Kaptsov E.I. Invariant finite-difference schemes for plane one-dimensional MHD flows that preserve conservation laws // MDPI Mathematics, 10(8):1250, 2022.
2. Kaptsov E.I., Dorodnitsyn V.A., and Meleshko S.V. Conservative invariant finite-difference schemes for the modified shallow water equations in Lagrangian coordinates // Studies in Applied Mathematics, 2022.
Принято в печать.
3. Dorodnitsyn V.A., Kaptsov E.I. Discrete shallow water equations preserving symmetries and conservation laws // J Math Phys. 2021;62(8):083508.
4. Dorodnitsyn V.A., Kaptsov E.I., Meleshko S.V. Symmetries, conservation laws, invariant solutions and difference schemes of the one-dimensional Green–Naghdi equations // J Nonlinear Math Phys. 2020;28:90-107.
5. Kaptsov E.I., Meleshko S.V., Analysis of the one-dimensional Euler–Lagrange equation of continuum mechanics with a Lagrangian of a special form // Applied Mathematical Modelling, 2020, Vol. 77, pp.1497–1511.
6. Дородницын В.А. Групповые свойства разностных уравнений. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2001.

ЧИСЛЕННЫЙ РАСЧЕТ ДИНАМИКИ ПРИЛИПАНИЯ В ДВУМЕРНОМ СЛУЧАЕ

Н.В. Ключнев¹, Ю.Г. Рыков²

¹*ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, n_klyushnev@mail.ru*

²*ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, yu-rykov@yandex.ru*

В докладе обсуждается численный расчет обобщенных решений системы уравнений газовой динамики без давления на основе приближенной динамики прилипания в двумерном случае. Интерес к средам без давления, то есть к средам, в которых отсутствует собственный перепад давления, возник при попытках описания сложных физических явлений [1], таких как эволюция многофазных потоков, движение дисперсных сред, в частности пылевых частиц или капель, взаимодействие гиперзвуковых потоков в некоторых предельных случаях и т.п. В одномерном случае эта задача исследована достаточно полно (см., например, [2,3]), однако случай многих пространственных переменных гораздо менее изучен. Это, по-

видимому, связано с тем, что, вообще говоря, при эволюции начальных функций возникает иерархия особенностей плотности, сосредоточенных на многообразиях разной размерности [4,5].

Сложность строгого математического анализа описанной задачи делает актуальным приближенный расчет ее решений. В данной работе для этого используется численная реализация динамики прилипания (adhesion dynamics), основанная на подходе, описанном в [6], который состоит в рассмотрении эволюции набора отдельных частиц, слипающихся при столкновениях. Новизна предложенной версии численного метода состоит в возможности получения с помощью нее результатов, наглядно иллюстрирующих образование иерархии особенностей плотности. Алгоритм верифицирован на ряде примеров с точки зрения внутренней сходимости и сравнения с теоретическими результатами, в том числе и других авторов (например, [7]).

Список литературы:

1. Крайко А.Н. // Прикладная математика и механика. 1979 №3 С.500-510.
2. E W., Rykov Yu.G., Sinai Ya.G. // Comm. Math. Phys. 1996 P.349-380.
3. Huang F., Wang Z. // Comm. Math. Phys. 2001 №1 P.117-146.
4. Аптекарев А.И., Рыков Ю.Г. // Доклады Российской Академии Наук. 2019 №6 С.655-658.
5. Рыков Ю.Г. // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. 2016 №94.
6. Chertock A., Kurganov A., Rykov Yu. // SIAM J. Numer. Anal. 2007 №6 P.2408-2441.
7. Pang Y. // J. Math. Anal. Appl. 2019 №2 P.2034-2074.

РАЗЛОЖЕНИЯ В ИНТЕРПОЛЯЦИОННЫЕ РЯДЫ ФУРЬЕ УЛУЧШЕННОЙ СХОДИМОСТИ ВДОЛЬ СТОРОН КВАДРАТА И РЕБЕР КУБА ДЛЯ РЕШЕНИЙ ЗАДАЧИ ДИРИХЛЕ

И.Ю. Колесников

Геофизический центр РАН, kol@wdcb.ru

В [1-3] на основе предложенных поточечных граничных суперпозиций, использующих однозначное соответствие между всеми граничными узлами и соответствующими им кардинальными функциями (функциями формы), были получены решения задачи Дирихле для уравнения Лапласа в квадрате и кубе. Предметом доклада

является рассмотрение характера поведения полученных решений в форме интерполяционных рядов Фурье на сторонах квадрата и ребрах куба с учетом вершин. Оказалось, что такие представления для равноотстоящих узлов на сторонах квадрата и на ребрах куба выражаются в форме одномерных спектральных интерполяционных разложений на отрезке $[0,1]$ в конечные ряды Фурье улучшенной сходимости $O(n^{-3})$, где n - число узлов на сторонах и на ребрах. Простым приведением подобных членов, отвечающим одним и тем же узлам на сторонах квадрата и на ребрах куба, удастся сформировать полное семейство неалгебраических кардинальных на отрезке $[0,1]$ функций с улучшенной сходимостью $O(n^{-3})$ для интерполяций на множестве равноотстоящих узлов (в отличие от известных кардинальных интерполяций Чебышева [4] для неравномерного множества узлов, которые сгущаются к концам отрезка). С точки зрения приложения кардинальных функций (функций формы), важно заметить, что в методе конечных элементов (МКЭ) интерполяционные алгебраические многочлены Чебышева обычно не применяются из-за трудностей вычислительной реализации численного интегрирования (обычно используются ортогональные полиномы Лежандра, структура которых упрощает численную процедуру интегрирования, однако часто требует привлечения интегральных формулировок Бубнова-Галеркина-Петрова). Применение неалгебраических спектральных кардинальных функций (функций формы) не вызывает каких-либо нестандартных вычислительных трудностей, поскольку реализация осуществляется в вычислительных рамках классической схемы МКЭ и его существующего программного обеспечения, что обеспечивает как простоту вычислений, так и качество неалгебраической спектральной аппроксимации. Макро-элементная структура неалгебраических спектральных конечных элементов [5] с произвольным числом граничных узлов и не требующих введения внутренних узлов (в отличие от существующих алгебраических конечных элементов на базе степенных и ортогональных полиномов в h и p – версиях МКЭ) предоставляет новые вычислительные возможности реализации, например, на пути использования аналитических достоинств методов граничных элементов (метода граничных интегральных уравнений) за счет организации эффективных макро-элементных параллельных вычислений.

Относительно известного решения [6] задачи Дирихле для уравнения Лапласа в кубе, учитывающего только заданные граничные условия на гранях куба и обнуляющегося на его ребрах и в вершинах, достаточно просто можно дополнить решение [6] спектральными разложениями по системе кардинальных функций (функций формы) [3] для узлов на ребрах и в вершинах, что в предельном случае приведет к

аналитическому решению в равномерно сходящихся рядах как для функции, так и для ее первых производных на граничной поверхности куба, улучшая при этом сходимость бесконечных рядов [6] с первого порядка $O(1/n)$ (неравномерная сходимость с эффектом Гиббса) до третьего порядка $O(n^{-3})$ (равномерная сходимость с однократным прямым дифференцированием рядов). Согласно лемме 2 [7, с.243] построенное решение равномерно сходится во всей области куба.

Список литературы:

1. Колесников И.Ю. Применение модульного подхода к расчету пластин // Изв. АН СССР. МТТ.1984. №5. С.136-141.
2. Колесников И.Ю. К построению общего решения волнового уравнения в параллелепипеде // 2-я Всес. конф. «Лаврентьевские чтения по математике, механике и физике». Тезисы докл. Киев: Ин-т математики АН УССР, 1985. С.114-115.
3. Горшков А.Г., Колесников И.Ю. Граничный оператор Грина и функции формы для канонического блока в пространственной задаче несвязанной термоупругости // Изв. АН СССР. МТТ. 1990. №3. С.14-21.
4. J.P. Boyd. Chebyshev & Fourier Spectral Methods. 2nd ed. Dover Publ., Inc., New York, 2001. 668p.
5. Горшков А.Г., Колесников И.Ю. Конечные элементы на основе полного семейства неполиномиальных функций формы для произвольного числа граничных узлов // Изв. РАН. МТТ.1998. №1. С.116-129.
6. Будак Б.М., Самарский А.А., Тихонов А.Н. Сборник задач по математической физике. – М.: Наука, 1980. 688с.
7. Петровский И.Г. Лекции об уравнениях с частными производными. – М.: Гос. Изд. Физ. – Мат. Лит., 1961. 400с.

“РАСЩЕПЛЕНИЕ” КВАТЕРНИОНА

В. А. Коломбет, **В. Н. Лесных**, А. В. Елистратов

*ИТЭБ РАН, Московская обл., Пущино, ул. Институтская, д.3,
v.kolombet@rambler.ru*

В математике можно ввести видоизмененное определение кватерниона, приводящее к своеобразному его «расщеплению». Гамильтон [1] не реализовал перспективную сейчас альтернативу компоновать кватернионы не из одномерных осей, а из трех комплексных плоскостей. В физике [2-4] в спектре масс легких субатомных частиц такая альтернатива рассматривается нами как

иллюстрация реального физического проявления этого «расщепления». В результате удаления пары лишних параметров возникают кватернионы $Q_A = (a+ib)(a+jc)(a+kd)$ и $Q_B = (a+ib)(c+jb)(d+kb)$, откуда (если квадрат интервала в СТО рассматривать как норму кватерниона, спроектированного в область реальных чисел) возникают энергии $E_A = 0$, $E_A = a^3$ и $E_B = 0$, $E_B = acd$. Для субатомных частиц до ~ 1 ГэВ метод Монте Карло дает вероятность случайности наблюдаемой тенденции около 1/500.

Таблица 1: Склонность к «квантованию» чисел $(m_x/m_e)^{1/3}$ у субатомных частиц x .

Легкая частица x	Масса (покоя) m_x (МэВ/ c^2)	$(m_x/m_e)^{1/3}$	Округленное значение $(m_x/m_e)^{1/3}$	Отклонение/0.25	Возможная интерпретация
γ	0	0	0.00	-	0_A
ν_e	≈ 0	≈ 0	0.00	-	0_B
ν_μ	≈ 0	≈ 0	0.00	-	0_B
ν_τ	≈ 0	≈ 0	0.00	-	0_B
e	0.5109989461(16)	1	1.00 или 1.00 ²	-	a^3 или acd
μ	105.6583745(24)	5.913273597(51)	6.00	0.3469	a^3
π^0	134.9768(5)	6.416235(8)	6.50	0.3351	a^3
π^+	139.57039(18)	6.488203(3)	6.50	0.0472	a^3
π^-	139.57039(18)	6.488203(3)	6.50	0.0472	a^3
K^+	493.677(16)	9.88570(11)	10.00	0.4578	a^3
K^-	493.677(16)	9.88570(11)	10.00	0.4578	a^3
K^L	497.611(13)	9.91189(9)	10.00	0.3524	a^3
K^S	497.611(13)	9.91189(9)	10.00	0.3524	a^3
η^0	547.862(17)	10.23490(11)	10.00	0.9396	a^3
$\rho(770)$	775.26(25)	11.4906(12)	11.50	0.0376	a^3
$\omega(782)$	782.65(12)	11.5264(6)	11.50	0.1056	a^3
$K^*(892)^+$	891.66(26)	12.0391(12)	12.00	0.1564	a^3

$K^*(892)^-$	891.66(26)	12.0391(12)	12.00	0.1564	a^3
$K^*(892)^L$	895.55(20)	12.0566(9)	12.00	0.2264	a^3
$K^*(892)^S$	895.55(20)	12.0566(9)	12.00	0.2264	a^3
p	938.272081(6)	12.245304708(39)	3.50^2	-	acd
n	939.565413(6)	12.250928512(39)	3.50^2	-	acd
$\eta'(958)$	957.78(6)	12.3296(3)	12.50	0.6816	a^3
$\phi(1020)$	1019.461(16)	12.58878(7)	12.50	0.3551	a^3

Список литературы:

1. Hamilton W.R. // *Lectures on Quaternions*. Hodges & Smith, Dublin, 1853.
2. Березин А.В., Березин Ю.В., Курочкин Ю. А., Толкачев Е.А. // Кватернионы в релятивистской физике. М.: УРСС, 2003.
3. Коломбет В.А. // Макроскопические флуктуации, массы субатомных частиц и дискретное пространство-время. Биофизика 37, 492, 1992.
4. Zyla et al. (Particle Data Group) // *Prog. Theor. Exp. Phys.* 2020, 083C01

МЕТОД РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЙ ЭЙЛЕРА ДЛЯ ДВИЖЕНИЯ СЖИМАЕМОЙ СРЕДЫ

А.В. Коптев

*Государственный университет морского и речного флота
имени адмирала С.О. Макарова, г. Санкт-Петербург.*

1. Введение. Уравнения Эйлера описывают движение жидких и газообразных сред при отсутствии внутреннего трения. Для случая 3D движения сжимаемой среды уравнения Эйлера вместе с уравнением неразрывности в современных обозначениях можно представить как [1]

$$\rho \frac{\partial u}{\partial t} + \rho u \frac{\partial u}{\partial x} + \rho v \frac{\partial u}{\partial y} + \rho w \frac{\partial u}{\partial z} = -\frac{\partial p}{\partial x}, \quad (1)$$

$$\rho \frac{\partial v}{\partial t} + \rho u \frac{\partial v}{\partial x} + \rho v \frac{\partial v}{\partial y} + \rho w \frac{\partial v}{\partial z} = -\frac{\partial p}{\partial y}, \quad (2)$$

$$\rho \frac{\partial w}{\partial t} + \rho u \frac{\partial w}{\partial x} + \rho v \frac{\partial w}{\partial y} + \rho w \frac{\partial w}{\partial z} = -\frac{\partial p}{\partial z}, \quad (3)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} = 0. \quad (4)$$

Где неизвестными являются компоненты вектора скорости u, v, w , плотность ρ , и давление p . Каждая из этих величин является некоторой функцией координат x, y, z и времени t .

Уравнения (1-4) являются нелинейными. Они представляют интерес и с чисто математической точки зрения и являются основой для моделирования и решения практических задач в различных областях. К таким областям можно отнести гидрометеорологию, медицину, добычу и транспортировку нефти и газа, судостроение, авиастроение.

На сегодняшний день какие-либо общепринятые подходы к решению уравнений (1-4) отсутствуют. В данной работе предложен один из возможных вариантов.

2. Подход к решению. Предлагаемый подход основан на свойстве уравнений (1-4), которое состоит в том, что каждое из них представимо в дивергентном виде

$$\frac{\partial P_i}{\partial x} + \frac{\partial Q_i}{\partial y} + \frac{\partial R_i}{\partial z} + \frac{\partial S_i}{\partial t} = 0, \quad (5)$$

где P_i, Q_i, R_i, S_i есть некоторые алгебраические комбинации неизвестных u, v, w, ρ, p . Для четвертого уравнения ($i = 4$) это очевидно, в виду $P_4 = \rho u, Q_4 = \rho v, R_4 = \rho w, S_4 = \rho$. Однотипные преобразования приводят к выводу, что и для первых трех уравнений ($i = 1; 2; 3$) представление (5) также имеет место, если положить

$$\begin{aligned} P_1 &= \rho u^2 + p, \quad Q_1 = \rho uv, \quad R_1 = \rho uw, \quad S_1 = \rho u, \\ P_2 &= \rho uv, \quad Q_2 = \rho v^2 + p, \quad R_2 = \rho vw, \quad S_2 = \rho v, \\ P_3 &= \rho uw, \quad Q_3 = \rho vw, \quad R_3 = \rho w^2 + p, \quad S_3 = \rho w. \end{aligned}$$

Каждое уравнение типа (5) допускает интегрирование в общем виде. Таким образом, каждое из уравнений (1-4) может быть проинтегрировано. В работе [2] показано, что в результате преобразований получающихся соотношений они приводятся к десяти основным, которые в совокупности представляют интеграл уравнений (1-4). Существенно, что в указанных соотношениях, наряду с основными неизвестными u, v, w, ρ, p , присутствуют и новые неизвестные функции Ψ_i , возникающие при интегрировании. Имеем превышение числа неизвестных над числом уравнений. Это обстоятельство весьма удобно при моделировании реальных процессов, так как появляются дополнительные возможности удовлетворить некоторым дополнительным соотношениям и условиям. Аналогичные закономерности имеют место и для более простого случая 2D движения сжимаемой среды, с той лишь разницей, что число неизвестных и число определяющих уравнений будет меньшим [3]. В результате появляются новые варианты построения точных решений уравнений Эйлера. В

частности, два новых решения уравнений (1-4), построенных таким образом, имеют вид

3. Точные решения.

Решение 1.

$$\begin{aligned}\rho &= 2e^{-7t+2x-4y+z} - 3e^{-21t+4x-8y+2z}, \quad p = -\frac{7}{2\rho}e^{-28t+6x-12y+3z}, \\ u &= \frac{(2e^{-7t+2x-4y+z} - 4e^{-21t+4x-8y+2z})}{\rho}, \quad v = \frac{(-2e^{-7t+2x-4y+z} + 5e^{-21t+4x-8y+2z})}{\rho}, \\ w &= \frac{(2e^{-7t+2x-4y+z} - \frac{7}{2}e^{-21t+4x-8y+2z})}{\rho}.\end{aligned}$$

Решение 2.

$$\begin{aligned}\rho &= 4e^{-t+16x-8y+4z} + 3e^{-2t+4x-2y+z}, \quad p = \frac{7}{4\rho}e^{-3t+20x-10y+5z}, \\ u &= \frac{(e^{-t+16x-8y+4z} + \frac{7}{4}e^{-2t+4x-2y+z})}{\rho}, \quad v = \frac{(2e^{-t+16x-8y+4z} + e^{-2t+4x-2y+z})}{\rho}, \\ w &= \frac{(e^{-t+16x-8y+4z} + e^{-2t+4x-2y+z})}{\rho}.\end{aligned}$$

Список литературы:

1. Лойцянский Л.Г. Механика жидкости и газа. М.: Наука, 2003.
2. Koptev A.V. Integral of the Euler Equations for 3D Motion of a Compressible Medium. – Journal of Mathematical Sciences, 2021, Vol.255, №6. – Springer, New York, – P. 679-689.
3. Koptev A.V., Voytko I.V. Integration of Euler Equations for 2D Motion of Compressible Medium Flow. – International Research Journal, 2018, №11-1(77). – Екатеринбург, P. 21-26.

ХОЛСТЕЙНОВСКИЙ ПОЛЯРОН В ПОСТОЯННОМ И СОВМЕСТНОМ ДЕЙСТВИИ ПОСТОЯННОГО И ПЕРЕМЕННОГО ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПОЛЕЙ

А.Н. Коршунова, В.Д. Лахно

ИМПБ РАН - филиал ИПМ им. М.В. Келдыша РАН

_alya@impb.ru, lak@impb.ru

Изучению движения зарядов в молекулярных полинуклеотидных цепочках посвящено большое количество

теоретических и экспериментальных работ. Актуальность этой проблемы связана с возможностью использования одномерных полинуклеотидных цепочек в качестве нанопроводов в нанобиоэлектронных устройствах.

В данном исследовании проведено численное моделирование движения заряда в холстейновской молекулярной цепочке при одновременном воздействии постоянного и переменного электрических полей.

Проведённые вычисления показывают существенные различия скорости и характера движения полярона в цепочке при воздействии только постоянного электрического поля и при одновременном воздействии постоянного и переменного электрических полей.

Проведенные ранее исследования [1]–[2] показывают, что равномерное движение полярона по цепочке возможно для небольших значений напряженности постоянного электрического поля. При больших значениях напряженности постоянного электрического поля равномерного движения не наблюдается, заряд, теряя свою первоначальную форму, движется по цепочке в направлении поля в режиме колебательного движения с блоховскими осцилляциями. Причем в цепочке, параметры которой соответствуют параметрам G/C цепочки ДНК, при небольших значениях напряженности электрического поля и начальном распределении заряда, которое близко к численному полюрону при заданных параметрах цепочки, заряд не сдвигается из своего начального положения. В работе [2] показана возможность неравновесного движения заряда в G/C цепочке ДНК из специально подобранных начальных условий. При достаточно больших значениях напряженности постоянного электрического поля начальный полярон, совершая блоховские осцилляции и постепенно теряя свою первоначальную форму, в течение долгого времени находится вблизи своего начального положения в цепочке.

В последнее время большое количество теоретических и экспериментальных работ посвящено исследованию движения заряда в переменном электрическом поле и суммарном постоянном и переменном поле [3]–[5]. Многие работы представляют исследование супер блоховских осцилляций, которые обусловлены наличием небольшой разницы между частотой блоховских осцилляций и частотой переменного электрического поля.

В представленной работе мы рассматриваем резонансный случай, когда частота блоховских осцилляций, задаваемая напряженностью постоянного электрического поля, совпадает с частотой переменного электрического поля. В этом случае супер блоховских осцилляций не наблюдается.

Моделирование движения полярона при одновременном воздействии постоянного и переменного электрических полей показало, что существует возможность движения заряда на очень большие расстояния. И даже в G/C цепочке ДНК полярон двигается по цепочке достаточно быстро. При этом характер движения полярона сильно отличается от характера движения полярона в постоянном электрическом поле. Блоховские осцилляции полярона в этом случае выглядят несколько иначе, и, при определенных параметрах, колебательный режим движения полярона демонстрирует движение полярона в среднем с постоянной скоростью.

Список литературы:

1. Коршунова А.Н., Лахно В.Д. Моделирование стационарных и нестационарных режимов движения заряда в однородной холстейновской цепочке в постоянном электрическом поле. Журнал технической физики. Т. 88. №9. С. 1312–1319, 2018.
[DOI:10.21883/JTF.2018.09.46414.14-18](https://doi.org/10.21883/JTF.2018.09.46414.14-18)
2. A.N. Korshunova, V.D. Lakhno. A new type of localized fast moving electronic excitations in molecular chains. Physica E. V. 60. P. 206–209, 2014. [DOI:10.1016/j.physe.2014.02.025](https://doi.org/10.1016/j.physe.2014.02.025)
3. Zhongkai Huang, Masayuki Hoshina, Hajime Ishihara, Yang Zhao, Transient Dynamics of Super Bloch Oscillations of a 1D Holstein Polaron under the Influence of an External AC Electric Field. *Annalen der Physik*, Vol. 531. 1800303, 2019. [DOI:10.1002/andp.201800303](https://doi.org/10.1002/andp.201800303)
4. C. Herrero-Gymez, E. Diaz, F. Domínguez-Adame. Super Bloch oscillations in the Peyrard–Bishop–Holstein model, Physics Letters A. Vol. 376. 555–558, 2012. [DOI:10.1016/j.physleta.2011.10.053](https://doi.org/10.1016/j.physleta.2011.10.053)
5. K. Kudo and T. S. Monteiro, Theoretical analysis of super–Bloch oscillations. Phys. Rev. A. Vol. 83. 053627, 2011.
[DOI:10.1103/PhysRevA.83.053627](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.83.053627)

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ БИБЛИОТЕКИ ФУНКЦИОНАЛЬНОГО ПРОГРАММИРОВАНИЯ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЧИСЛЕННЫХ ЗАДАЧ НА ГРАФИЧЕСКИХ УСКОРИТЕЛЯХ С ТЕХНОЛОГИЕЙ CUDA

М.М. Краснов, О.Б. Феодоритова

*Федеральное государственное учреждение "Федеральный
исследовательский центр
Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша Российской
академии наук",
г. Москва*

Современные графические ускорители (GPU) позволяют существенно ускорить выполнение численных задач. Однако перенос программ на графические ускорители является непростой задачей. Иногда перенос программ на такие ускорители осуществляется путём практически полного их переписывания (например, при использовании технологии OpenCL). При этом возникает непростая задача поддержки двух независимых исходных кодов. Однако, графические ускорители CUDA, благодаря разработанной компанией NVIDIA технологии, позволяют иметь единый исходный код как для обычных процессоров (CPU), так и для CUDA. Машинный код, генерируемый при компиляции этого единого текста, зависит от того, каким компилятором он компилируется (обычным, таким, как gcc, icc и msvc, или компилятором для CUDA, nvcc). Однако, в этом едином исходном коде нужно каким-то образом указать компилятору, какие части этого кода нужно распараллеливать на общей памяти. Для CPU это обычно делается с помощью OpenMP и специальных прагм компилятору. Для CUDA распараллеливание делается совершенно по-другому. Применение разработанной авторами библиотеки функционального программирования позволяет скрыть использование того или иного механизма распараллеливания на общей памяти внутри библиотеки и сделать пользовательский исходный код полностью независимым от используемого вычислительного устройства (CPU или CUDA). В настоящем докладе показывается, как это можно сделать. Предлагаемый подход применен для переноса на графические ускорители программного кода MCFL для численного моделирования течения вязкого теплопроводного многокомпонентного газа, взаимодействующего с твердым телом [7].

Modern graphics accelerators (GPUs) can significantly speed up the execution of numerical tasks. However, porting programs to graphics accelerators is not an easy task. Sometimes the transfer of programs to such

accelerators is carried out by almost completely rewriting them (for example, when using the OpenCL technology). This raises the daunting task of maintaining two independent source codes. However, CUDA graphics accelerators, thanks to technology developed by NVIDIA, allow you to have a single source code for both conventional processors (CPUs) and CUDA. The machine code generated when compiling this single text depends on which compiler it is compiled with (the usual one, such as gcc, icc and msvc, or the compiler for CUDA, nvcc). However, in this single source code, you need to somehow tell the compiler which parts of this code to parallelize on shared memory. For the CPU, this is usually done using OpenMP and special pragmas to the compiler. For CUDA, parallelization is done in a completely different way. The use of the functional programming library developed by the authors allows you to hide the use of one or another parallelization mechanism on shared memory within the library and make the user source code completely independent of the computing device used (CPU or CUDA). This article shows how this can be done. The proposed approach is used to transfer to graphics accelerators the MCFL program code for numerical simulation of the flow of viscous thermally conductive multicomponent gas interacting with a solid body [7].

Список литературы:

1. М.М. Краснов. Библиотека функционального программирования для языка C++. Программирование, 2020 г., № 5, с. 47-59.
DOI: 10.31875/S0132347420050040
2. J.O. Coplien. Curiously recurring template patterns. C++ Report, February 1995, pp. 24–27.
3. David Abrahams, Aleksey Gurtovoy. C++ Template Metaprogramming. Addison-Wesley, 2004, 400 с. ISBN 978-0-321-22725-6.
4. М.М. Краснов. Метапрограммирование шаблонов C++ в задачах математической физики. М.: ИПМ им. М.В. Келдыша, 2017. 84 с. DOI: 10.20948/mono-2017-krasnov
5. T. Veldhuizen, Expression Templates. C++ Report, Vol. 7 № 5, June 1995, pp. 26-31.
6. Bjarne Stroustrup. The C++ Programming Language, Fourth Edition. Addison-Wesley, 2013. ISBN 978-0-321-56384-2, 1368 с.
7. O.B. Feodoritova, M.M. Krasnov, V.T. Zhukov. A Numerical Method for Conjugate Heat Transfer Problems in Multicomponent Flows. // J.Phys.Conf.Ser., 2021. Vol.2028 012024, doi:10.1088/1742-6596/2028/012024

ПРИМЕНЕНИЕ МНОГОМАСШТАБНЫХ МЕТОДОВ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ УПРУГОЙ ДЕФОРМАЦИИ ГЕОЛОГИЧЕСКИХ СРЕД

А.Ю. Кутищева^{1,2}, Э.П. Шурина^{1,2}

¹*ФГБУН Институт нефтегазовой геологии и геофизики им. А.А.
Трофимука СО РАН, KutischevaAY@ipgg.sbras.ru*

²*ФГБОУ ВО Новосибирский государственный технический
университет*

Сложность решения задачи упругой деформации геологических сред в первую очередь связана с существенной гетерогенностью области моделирования. Кроме того, ряд приложений предполагает подвижность внутренней структуры, например деформация многолетнемерзлых пород с учетом таяния.

В рамках данной работы выполнено сравнение гетерогенного многомасштабного метода конечных элементов (FE-НММ) и расширенного гетерогенного многомасштабного метода конечных элементов (XFE-НММ) применительно к задачам упругой деформации пористых сред. Поскольку ранее было получено, что оба метода обеспечивают близкую точность на сопоставимых сеточных разбиениях, то основным критерием сравнения выступают затраты вычислительных ресурсов. Ввиду особенностей данных методов классические алгоритмы FE-НММ оказываются значительно быстрее их модификаций на базе разрывного метода конечных элементов для стационарных задач. А именно, FE-НММ требует наличия иерархического сеточного разбиения, которое на нижнем уровне иерархии (микроуровень) точно отражает границы пор, что позволяет достаточно быстро построить необходимые функциональные подпространства с использованием стандартных конечноэлементных базисов на микроуровне и получить соответствующие неполиномиальные функции формы на макроуровне. Однако при каждом изменении внутренней структуры сеточные разбиения должны быть перестроены, что не является необходимым для XFE-НММ, поскольку в нём внутренние границы учитываются только в базисных функциях на микроуровне. То есть, на микроуровне конечноэлементная сетка строится без учета внутренних границ, но при сборке соответствующих дискретных вариационных постановок базисные функции конечных элементов, через которые проходят внутренние границы модифицируются специальным образом. Такой подход требует вовлечения дополнительных ресурсов в процесс решения, однако в случае решения задач деформации с учетом подвижности

внутренних границ (например, процесс разрушения) это может снизить затраты по сравнению с классическими сеточными подходами.

Работа поддержана грантом Президента Российской Федерации МК-3230.2022.1.5 .

ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ВИХРЕВЫХ СТРУКТУР НА УСТОЙЧИВОСТЬ НЕЛИНЕЙНЫХ ВОЛН.

**В.С. Лапонин¹, С.А. Складчиков¹, С.В. Анпилов¹,
Н.П. Савенкова¹**

¹ МГУ имени М.В. Ломоносова, факультет ВМК, lap@cs.msu.ru

Главной причиной возникновения волн является ветер. Даже слабый ветер создает волны. Изучению ветровых волн и их эволюции посвящено большое количество работ, например [1-5]. Тем не менее, многие вопросы до сих пор остались не выясненными.

Рассмотрим замкнутый кольцевой канал, в начальный момент времени в канале находится покоящаяся жидкость (вода), занимающая половину объема в установке, оставшийся объем заполнен воздухом. Ветер создается четырьмя вентиляторами, расположенными равномерно над каналом. В ходе численных экспериментов мощности вентиляторов будут изменяться, именно из-за этого будет формироваться то или иное количество условно устойчивых конфигураций на поверхности жидкости.

В результате математического моделирования на поверхности воды образуются волновые движения, которые начинаются с очень малых капиллярных волн (волн ряби). Со временем амплитуда и длина волны увеличиваются, причем амплитуда нарастает быстрее, чем длина. Когда эти волны достигают определенной длины и крутизны, ситуация меняется: увеличение длины волны идет быстрее, чем рост амплитуды, в результате чего крутизна уменьшается. В жидкости образуются вихревые структуры, направленные по ходу движения волны, и внутренние вихри, направленные на самоподдержание условно устойчивой волны. Также в подветренной части волн образуются вихревые движения воздуха.

Список литературы:

1. Юэн Г., Лэйк Б. Нелинейная динамика гравитационных волн на глубокой воде. М.: Мир, 1987.
2. Степанянц Ю.А., Фабрикант А.Л. Распространение волн в сдвиговых потоках. Современные проблемы физики. М.: Физматлит, 1996.

3. Holthuijsen, L.H. (2007), «Waves in oceanic and coastal waters», Cambridge University Press, ISBN 0521860288
4. Falkovich, Gregory (2011), «Fluid Mechanics (A short course for physicists)», Cambridge University Press, ISBN 978-1-107-00575-4
5. Математическое моделирование формирования уединенной волны на поверхности жидкости. Р.Н. Кузьмин, В.С. Лапонин, Н.П. Савенкова, С.А. Складчиков // Инженерная физика. — 2014. — № 8. — С. 19–24.

БИОИНФОРМАТИКА И НАНОБИОЭЛЕКТРОНИКА.

В.Д. Лахно

*Институт Математических Проблем Биологии РАН - филиал
института прикладной математики им. М.В. Келдыша Российской
Академии Наук, lak@impb.ru*

Биоинформатика представляет собой область, которая развивает методы и программное обеспечение для анализа и обработки биологических данных и включает в себя анализ последовательностей, экспрессию генов и белков, анализ клеточной организации, создание Дата-центров и т. д.

Молекула ДНК представляет собой уникальный пример хранилища данных и может быть использована для биокомпьютинга. Совершая одновременно миллионы операций ДНК-биокомпьютер позволяет экспоненциально увеличивать производительность с увеличением числа олигонуклеотидов. Ограничение производительности такого биокомпьютера обусловлено ограничением скорости проведения параллельных операций, измеряемых часами. Преодолеть эти ограничения призвана нанобиоэлектроника.

Центральной задачей нанобиоэлектроники является реализация эффективного переноса заряда в биомакромолекулах. Наиболее перспективной для осуществления такого переноса является молекула ДНК. Компьютерное моделирование такого переноса в настоящее время способно заменить натурный эксперимент. Приведены результаты моделирования транспорта заряда в форме блоховских осцилляций, солитонного переноса, поляронной и бризерной динамики. Рассматриваются вопросы моделирования заряда при конечных температурах. Обсуждаются различные молекулярные устройства на основе ДНК.

Список литературы:

1. Lakhno V.D., DNA Nanobioelectronics // Int. J. Quantum Chem, 2008, v.108, p. 1970-1981
2. Lakhno V.D., Theoretical basis of Nanobioelectronics // EPJ Web of Conferences, 2020, **226**, 01008
3. Lakhno V.D., Vinnikov A.V., Molecular devices based on DNA // MBB, 2021, v. 16, p. 115-135

ФОРМИРОВАНИЕ И ЭВОЛЮЦИЯ КРУПНОМАСШТАБНЫХ ВИХРЕВЫХ СТРУКТУР В АККРЕЦИОННЫХ ЗВЕЗДНЫХ ДИСКАХ

З.Д. Ливенец¹, А.Ю. Луговский^{1,2}

¹ *Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», г. Москва*

² *ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, г. Москва, zaharus@inbox.ru*

Целью работы является исследование свойств аккреционных звездных дисков при моделировании нестационарных процессов в них. Подобные газовые диски формируются вокруг компактных небесных тел большой массы. Таким объектом может быть нейтронная звезда или черная дыра. В результате захвата гравитационным полем звезды межзвездного газа с большим угловым моментом возникает аккреционный диск. Для того, чтобы вещество аккрецировало (падало) на звезду, необходим отвод углового момента от вещества диска. Известно много механизмов отвода углового момента от вещества аккреционного диска, но все они имеют те или иные недостатки.

Особый интерес представляет развитие крупномасштабной турбулентности в сдвиговом течении аккреционного диска, для изучения которого используется компьютерное моделирование данного процесса. Интересно проверить некоторые гипотезы. Возможно ли появление крупномасштабных вихрей в сдвиговом течении аккреционного диска? Способны ли подобные структуры привести к перераспределению углового момента и обеспечить необходимый темп аккреции (массовая скорость падения вещества на центральное тело)? Правомерен ли двумерный подход для изучения аккреционных дисков?

В работе исследуется новый механизм переноса углового момента крупными вихревыми структурами, возникающими в сдвиговом течении вещества аккреционного диска.

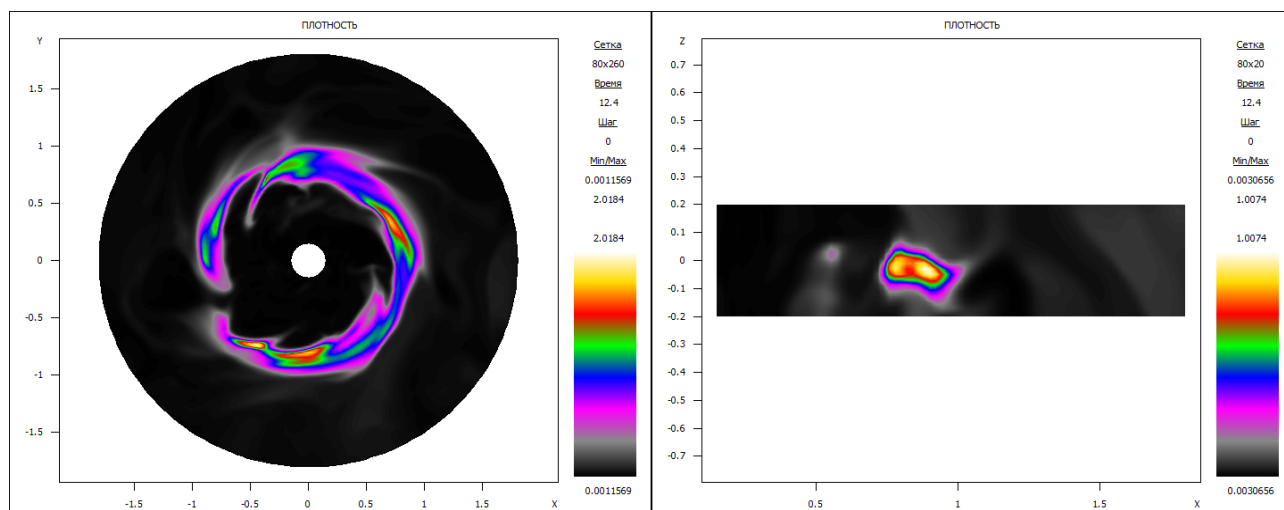


Рис. Распределение плотности в аккреционном диске.

Слева - сечение $z=0$, справа – сечение $\phi=0$.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант 20-11-20165).

Список литературы:

1. Ливенец З.Д., Луговский А.Ю. Формирование и эволюция крупномасштабных вихревых структур в аккреционных звездных дисках // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. 2022. № 5. С. 1-19.
2. Велихов Е.П., Луговский А.Ю., Мухин С.И., Попов Ю.П., Чечеткин В.М. Роль крупномасштабной турбулентности в перераспределении углового момента в аккреционных звездных дисках // Астрономический журнал. 2007. Т. 84. №2. С. 177-184.
3. Луговский А. Ю., Мухин С.И., Попов Ю.П., Чечеткин В.М. Развитие крупномасштабной неустойчивости в аккреционных звездных дисках и ее влияние на перераспределение углового момента // Астрономический журнал. 2008. Т. 85. №10. С. 901-905.
4. Луговский А.Ю., Чечеткин В.М. Развитие крупномасштабной неустойчивости в Кеплеровских аккреционных звездных дисках // Астрономический журнал. 2012. Т. 89. №2. С. 120-127.

ПРОБЛЕМА ХРАНЕНИЯ И ОБРАБОТКИ ТРАЕКТОРИЙ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ В СУБД

И.В. Лихачев

*ИМПБ РАН – филиал ИПМ им. М.В. Келдыша РАН,
ilya_lihachev@mail.ru*

Метод моделирования молекулярной динамики (МД) является общепринятым методом исследования биологических структур. Результатами МД расчётов служат траектории молекулярной динамики – записи координат атомов через определённые, обычно одинаковые, промежутки времени. К настоящему моменту времени во многих лабораториях накоплено большое количество файлов траекторий.

В рамках рабочего программного продукта, Анализатора траекторий молекулярной динамики (TAMD), активно используемого для работы с траекториями молекулярной динамики, были испытаны различные способы хранения и доступа к траекториям в СУБД различных видов.

Построение классической структуры реляционной СУБД для хранения траекторий молекулярной динамики не подходит для хранения существенных объемов информации. Основная причина – возникновение большого количества строк в одной таблице. Следствие – низкая скорость выполнения запросов, существенный объем индексных файлов.

NoSQL-подход на базе MongoDB даёт лучшие результаты по быстродействию. Кадр траектории хранится в одном поле. Подход пригоден для построения больших хранилищ траекторий молекулярной динамики.

Несмотря на очевидное преимущество MongoDB-подхода по скорости, при построении хранилища, выбор может быть сделан в пользу MySQL+JSON подхода, ввиду большей известности этой СУБД, лучшей документированности и большего количества API и полезных утилит.

СУБД	Время чтения одного кадра
Текстовый файл	55 мс
MySQL	300 мс
MySQL (JSON)	30 мс
MongoDB	4 мс

Рис.1. Сравнение времени получения одного кадра траектории при использовании разных СУБД.

РАСЧЕТ И ИСПОЛЬЗОВАНИЕ КАРТ ПЕРЕМЕННОГО РАЗРЕШЕНИЯ В СТРУКТУРНОЙ БИОЛОГИИ

В.Ю. Лунин

ИМПБ РАН - филиал ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, lunin@impb.ru

При исследовании структуры макромолекулярных биологических объектов дифракционными методами или методами криоэлектронной микроскопии основой для построения приближенной атомной модели объекта являются трехмерные "топографические" карты экспериментально определяемых распределений, связанных с объектом. Примерами таких распределений являются плотность электронов или ядер или электростатический потенциал. Экспериментально полученные распределения "интерпретируются", т.е. представляются в виде суммы вкладов, отвечающих отдельным атомам, форма которых известна из теории, но неизвестны их центры, т.е. координаты атомов. Полученные в результате такой интерпретации предварительные координаты атомов далее уточняются посредством минимизации невязки между экспериментальными картами и теоретически рассчитанными по координатам атомов распределениям. Основной сложностью в реализации такого подхода является то, что экспериментальные карты содержат ряд искажений, которые делают невозможным прямое сравнение с теоретическими распределениями и требует предварительной деформации теоретических распределений посредством внесения похожих искажений. Два основных типа искажений в экспериментальных картах, это позиционная неупорядоченность атомов и потеря разрешения, которая может быть различной для различных частей объекта. Первая причина связана как с тепловым движением атомов в процессе эксперимента, так и с получением экспериментальных карт путем усреднения большого числа не вполне идентичных копий объекта. Соответствующие искажения моделируются сверткой теоретического распределения плотности в атоме с индивидуальной для этого атома трехмерной Гауссовой функцией. Локальная потеря разрешения для отдельного атома может быть смоделирована сверткой теоретического распределения с трехмерной интерференционной функцией, что помимо "размазывания" плотности атома приводит к появлению в этом изображении трехмерных сферических знакопеременных всплесков.

Нами предложено [1] разложение трехмерной интерференционной функции в сумму элементарных функций, сохраняющих свойство Гауссовой функции не менять формы при свертке с другой Гауссовой функцией. Это позволяет эффективно производить расчет теоретических карт, искаженных локальной позиционной неупорядоченностью и локальной потерей разрешения.

Список литературы:

1. Urzhumtsev, A.G. & Lunin, V.Y. // *BioRxiv*, 10.1101/2022.03.28.486044

ОЦЕНКА ЛОКАЛЬНОГО РАЗРЕШЕНИЯ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ КАРТ В СТРУКТУРНОЙ БИОЛОГИИ

Н.Л. Лунина, В.Ю. Лунин

ИМПБ РАН - филиал ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, lunina@impb.ru

Получаемые по результатам эксперимента карты различных физических распределений (плотности электронов или ядер, электростатического потенциала, и т.п.) являются основой для построения атомной модели исследуемого объекта и уточнения параметров этой модели. В силу условий эксперимента и возможной гетерогенности отдельных частей изучаемого объекта, экспериментально найденные распределения отличаются от теоретически рассчитанных распределений, соответствующих имеющейся атомной модели. В частности, это проявляется в снижении разрешения получаемых изображений объекта, которое, вообще говоря, может быть различным для различных областей объекта. Второй важной причиной деформации экспериментальных карт является локальная позиционная неупорядоченность атомов (динамическая и статическая). Оба указанных источника погрешностей вызывают «расплывание» пиков плотности, отвечающих центрам атомов, но локальная потеря разрешения вызывает, кроме того, возникновение «волн обрыва ряда», появление чередующихся по знаку сферических оболочек относительно высоких значений.

Предложенная недавно [1] эффективная процедура введения в процесс расчета теоретических распределений корректировок, учитывающих локальные потери разрешения и позиционной неупорядоченности атомов, позволила решать прямую задачу, т.е. рассчитывать скорректированные теоретические распределения, отвечающие атомной модели, при заданных значениях локального

разрешения и позиционной неупорядоченности отдельных частей получаемой карты. В данной работе обсуждается подход к решению обратной задачи, т.е. к определению для различных точек экспериментальной карты величин локального разрешения и позиционной неупорядоченности при наличии предварительной атомной модели объекта. Проведенное тестирование показало возможность разграничения влияний на получаемое изображение локального разрешения и позиционной неупорядоченности, несмотря на визуальную схожесть эффекта расплывания центрального пика.

Список литературы:

1. Urzhumtsev, A.G. & Lunin, V.Y. // *BioRxiv*, 10.1101/2022.03.28.486044

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕЧЕНИЙ ОКОЛО КРЫЛЬЕВ СО СВЕРХЗВУКОВЫМИ КРОМКАМИ

Ф.А. Максимов

*Институт автоматизации проектирования РАН,
f_a_maximov@mail.ru*

Течение около острой кромки при моделировании на основе уравнений Эйлера имеет особенность - газодинамические параметры в кромке неоднозначны. Это необходимо учитывать. Для реализации возможности описания многозначного решения, предлагается строить сетку, координатные линии которой в одном из направлений представляют собой набор лучей, исходящих из кромки (в локальной области около кромки). А в качестве граничного условия поставить условие коничности течения относительно кромки. Т.е. равенства нулю производных газодинамических функций вдоль лучей из кромки. Если кромка является сверхзвуковой, то решение остается постоянным вдоль прямых проведенных из этой кромки, т.е. реализуется коничность течения относительно кромок. Надо отметить, что коничность течения около кромок реализуется только в некоторой их окрестности. Граничное условие коничности течения ставится на задаваемой границе, которая может быть расположена с некоторым допуском по положению, но обязательно в области действительно локального конического течения относительно кромки. Для моделирования обтекания конических тел с острой сверхзвуковой кромкой реализованы способы построения сетки около звездообразного тела, плоского и V- или Λ- образного крыла, около крыла с центральным

телом (рис.1). Граничное условие коничности течения относительно кромки является достаточным для построения решения.

Проведены расчеты обтекания нескольких вариантов геометрий тел различных типов с фиксированной площадью мидела и размаха лопасти крыла, сравниваются их аэродинамические характеристики.

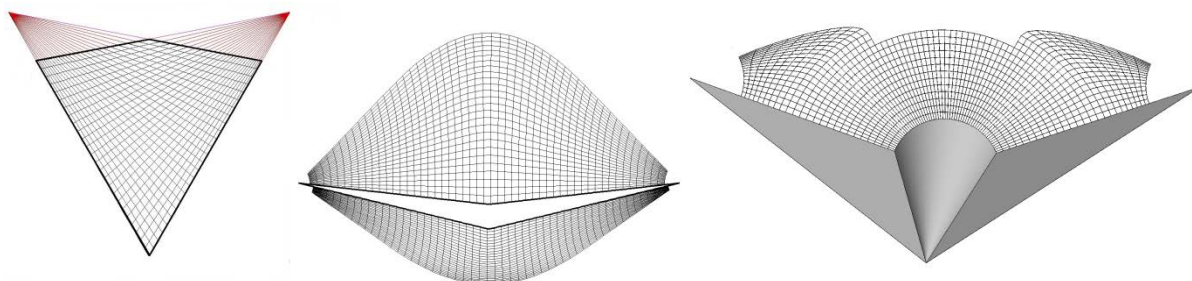


Рис.1. Примеры расчетных сеток внутри цикла звездообразного тела, V-образного крыла без и центральным телом.

Список литературы:

1. Maksimov F.A. Simulation of flows near wings with supersonic edges// Smart Innovation, Systems and Technologies. 2022. V.274, pp.87-103.

**МНОГОМАСШТАБНОЕ МАТЕМАТИЧЕСКОЕ
МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИКИ ФЛЮИДОВ С
РЕОЛОГИЧЕСКИМИ СВОЙСТВАМИ НЬЮТОНОВСКИХ
ЖИДКОСТЕЙ В ГЕОЛОГИЧЕСКИХ СРЕДАХ ПРИ
ИСПОЛЬЗОВАНИИ ИХ ДИСКРЕТНЫХ
ГЕОМЕТРИЧЕСКИХ АНАЛОГОВ**

С.И. Марков^{1,2}, Э.П. Шурина^{1,2}, Н.Б. Иткина^{2,3}

¹*Институт нефтегазовой геологии и геофизики им. А.А. Трофимука
СО РАН,*

²*Новосибирский государственный технический университет,*

³*Институт вычислительных технологий СО РАН,*

www.sim91@list.ru

Развитие алгоритмов математического моделирования и увеличение вычислительных ресурсов позволяют применять прямые гидродинамические расчёты для изучения фильтрационно-ёмкостных свойств пород-коллекторов при использовании рентгеновской томографии кернов.

Под дискретной геометрической моделью понимается конечное множество элементов с физическими свойствами стохастической природы, которая определяется индикаторной функцией принадлежности каждого элемента пространству матрицы образца или пор. Поскольку значение индикаторной функции в точке зависит от погрешности измерительной аппаратуры, алгоритмов фильтрации и сегментации, то задача определения репрезентативного объёма (RVE – representative volume element) не всегда имеет решение. Естественное расширение RVE – это статистический элемент объёма (SVE – statistical volume element). При построении SVE используется прямой гидродинамический расчёт в связанной системе каналов и пустот для определения фильтрационно-ёмкостных свойств кернов.

Многомасштабный подход для решения данной задачи сталкивается с двумя сложностями: дискретизация континуальных моделей течения флюидов в системе каналов и пустот требует больших вычислительных затрат, а применение феноменологических моделей приводит к физически нерелевантному результату.

В работе предлагается использовать иерархическую дискретизацию геометрической модели керна: макромасштабная сетка (полиэдральная) для описания структуры образца и микромасштабная сетка (тетраэдрическая) для описания микроструктуры в каждом макроэлементе. На базе методов объёмного осреднения выстраивается иерархия математических моделей течения жидкостей: модель Стокса на микроуровне, модель Бринкмана на каждом макроэлементе и модель Дарси на уровне керна.

Пространственная дискретизация данных моделей выполнена на базе вычислительных схем смешанного разрывного метода Галёркина при использовании иерархических базисов пространств H_{div} и L_2 . Иерархическая структура базисов позволяет построить адаптированные многоуровневые решатели систем линейных алгебраических уравнений.

Приводятся результаты математического моделирования и сравнение с данными физических экспериментов.

Работа выполнена при финансовой поддержке Проекта FWZZ-2022-0030.

ПОСТРОЕНИЕ ВИРТУАЛЬНОЙ МЕДИКО- БИОЛОГИЧЕСКОЙ ВЕБ-ЛАБОРАТОРИИ С ДОСТУПОМ К НРС-РЕСУРСАМ ЧЕРЕЗ ВЕБ-КЛИЕНТОВ

С.А. Махортых, А.В. Москаленко

ИМПБ РАН - филиал ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, mathnet@mail-avm.ru

Современная тенденция развития прикладной вычислительной математики состоит в предоставлении конечному пользователю удобного веб-интерфейса, экранирующего монотонные действия, связанные с разверткой и управлением исполняемого на вычислителе классического приложения [1]; такие информационно-вычислительные системы со специальными пользовательскими интерфейсами удобно обозначать как веб-лаборатории. Такой подход полезен как в предметно-научной, так и в образовательной деятельности, поскольку позволяет сконцентрироваться непосредственно на поставленной задаче, без отвлечения на администрирование. Вместе с тем, использование таких систем пока в основном ограничено задачами инженерными. Развитие веб-лабораторий для вычислительной биологии с целью решения медико-биологических проблем стало программной целью международного проекта «Физиом» [2]. В частности, ожидается, что в условиях острой необходимости импортозамещения создание отечественной специализированной веб-лаборатории окажет существенное содействие для становления российской физики сердца (кардиофизики) [3]. В данной работе будет представлен опыт построения медико-биологической веб-лаборатории, обеспечивающей функциональные и интерактивные приложения для пользовательского взаимодействия с удаленными вычислительными ресурсами и, в частности, обеспечивающей доступ к ресурсам частного проекта «Российский Физиом». Непосредственно веб-лаборатория строится на клиент-серверном подходе, с использованием стека MEAN [4] — мощной платформы, на всех уровнях которой применяется всего один язык: JavaScript, — что для конечного пользователя обеспечивает скорость и отзывчивость приложений, составляющих веб-лабораторию.

Список литературы:

1. Маркизов С.Н. Поляков С.В., Подрыга В.О., Пузырьков Д.В., Тарасов Н.И., Толстов И.О. // Тезисы докладов международной конференции, посвященной 100-летию К.И. Бабенко 2019 С.107-108.

2. Москаленко А.В., Тетуев Р.К., Махортых С.А. // Препринты ИПМ им. М. В. Келдыша 2018 №61 32с.
3. Москаленко А.В., Тетуев Р.К., Махортых С.А. // The scientific heritage 2020 №56 С.13-32.
4. Холмс С. Стек MEAN. Mongo, Express, Angular, Node. // СПб.: Питер 2017 496с.

СХЕМЫ ПОВЫШЕННОГО ПОРЯДКА АППРОКСИМАЦИИ ДЛЯ РАСЧЕТА ДИНАМИКИ ВЯЗКОПЛАСТИЧЕСКИХ СРЕД

И.С. Никитин¹, В.И. Голубев^{1,2}, А.А. Скубачевский^{1,2}

¹Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт автоматизации проектирования Российской академии
наук, i_nikitin@list.ru

²Федеральное государственное автономное образовательное
учреждение высшего образования «Московский физико-технический
институт (национальный исследовательский университет)»,
w.golubev@mail.ru

Рассмотрим безграничную упругую среду с ориентированной системой периодически повторяющихся параллельных плоскостей скольжения. Ориентация этой системы может быть задана единичной нормалью к данным плоскостям. Условия контактного взаимодействия слоев, соответствующие вязкопластическому проскальзыванию, примем в виде степенного условия скольжения с малым коэффициентом вязкости. В режиме скольжения в определяющие уравнения для касательных напряжений включается нелинейный свободный член с малым параметром вязкости в знаменателе [1, 2]. Система становится жесткой, и обычные явные схемы будут неустойчивыми. Для того чтобы обойти эти затруднения, предлагается использовать явно- неявный метод. Неявная аппроксимация применяется только для тех уравнений, которые содержат малый параметр в знаменателе свободного члена, остальные уравнения аппроксимируются явно.

С целью согласования порядков аппроксимации явного упругого шага и корректировочной численной процедуры построена неявная схема второго порядка аппроксимации для определяющих уравнений слоистой среды с нелинейными вязкопластическими членами. Эта нелинейная система уравнений разрешается аналитически, используя метод разложения по малому параметру. Получена корректировочная

формула для касательных напряжений после упругого шага при произвольном степенном показателе.

С использованием этого метода был решен ряд задач распространения и рассеяния упругих волн на слоистом флюидонасыщенном массиве в неоднородной геологической среде.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 19-71-10060).

Список литературы:

1. Nikitin I.S. Dynamic models of layered and block media with slip, friction, and separation // *Mechanics of Solids* 2008 No. 43(4) P.652-661.
2. Burago N.G., Nikitin I.S. Improved model of a layered medium with slip on the contact boundaries // *Journal of Applied Mathematics and Mechanics* 2016 No. 80(2) P.164-172.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РОСТА И ВЕТВЛЕНИЯ УСТАЛОСТНЫХ КВАЗИТРЕЩИН

И.С. Никитин¹, А.Д. Никитин¹, Б.В. Волков¹

¹ *Институт автоматизации проектирования РАН, i_nikitin@list.ru*

Усталостное разрушение материалов при циклических нагрузках является многостадийным процессом, состоящим из зарождения, роста трещины и финального долома. Кинетика указанных процессов в значительной степени зависит от напряженно-деформированного состояния в цикле (НДС), физико-механических характеристик материала, а также истории нагружения. Моделирование подобных процессов является комплексной задачей вычислительной механики. В практических приложениях зачастую используются упрощенные модели, позволяющие прогнозировать количество циклов до зарождения трещины на основании анализа НДС в начальный момент нагружения. Для оценок периода роста используют модель Париса, связывающую скорость роста трещины с коэффициентами интенсивности напряжений. Указанные подходы не позволяют определить ряд важных характеристик процесса усталостного разрушения.

В настоящей работе предлагается подход, основанный на представлениях о повреждаемости материала под действием циклической нагрузки [1]. Вводится кинетическое уравнение для функции повреждаемости. Предполагается, что механические свойства материала деградируют с ростом функции повреждаемости. В областях,

где функция повреждаемости достигает критического значения, материал считается разрушенным, его упругие характеристики принимают малые значения. Локализованные узкие зоны с критической повреждаемостью рассматриваются как квазитрещины. Параметры уравнения для повреждаемости зависят от НДС и учитывают кинетику процессов зарождения и роста. Задача о развитии квазитрещин решается с помощью МКЭ шагами по циклам нагружения, с пошаговым вычислением значений повреждаемости и корректировкой соответствующих свойств материалов в каждом узле сетки. Для учета типа трещин вводится два механизма накопления повреждаемости – по критериям нормальных и сдвиговых напряжений. Таким образом модель и численный метод позволяют определять область зарождения, тип трещин, продолжительность стадий зарождения и роста, а также изменение траектории и типа трещин в зависимости от реализованного НДС. Модель применена для численного моделирования роста усталостных трещин в образцах из титанового сплава, подверженных крутильным испытаниям. Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ (проект № 19-19-00705-П).

Список литературы:

1. Никитин И.С., Бураго Н.Г., Журавлев А.Б., Никитин А.Д. Мульти-режимная модель развития усталостных повреждений. ПММ. 2020. Т. 84. № 5. С. 663–674.

АЛЬФА-ЭФФЕКТ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ В ПРИСУТСТВИИ ТРЕХМЕРНОГО КОГЕРЕНТНОГО ВИХРЯ ПРОВОДЯЩЕЙ ЖИДКОСТИ

Л. Л. Огородников^{1,2}, С. С. Вергелес^{1,2}

¹*НИУ Высшая школа экономики, Москва, ул. Старая Басманная, д. 21/4, noel95@mail.ru*

²*ИТФ им. Л.Д. Ландау, Московская обл., г. Черноголовка, ул. Ак. Семенова, д. 1-А, ssver@itp.ac.ru*

Большой интерес представляет исследование когерентных вихревых течений – статистически устойчивых формирований, завихренность которых скоррелирована во всей области их существования [1]. Успехи в экспериментальных и численных исследованиях последних лет позволили создать теорию двумерных [2] и трехмерных когерентных вихрей [3]. Широко известным примером

трехмерного когерентного вихревого течения является торнадо [4], похожие течения реализуются в жидком внешнем ядре Земли [5]. В работе [3] исследовался аналитически механизм поддержания когерентного вихря в статистически устойчивом состоянии в быстро вращающейся турбулентной трехмерной несжимаемой жидкости. Число Россби предполагалось малым как для мелкомасштабных турбулентных пульсаций, так и для крупномасштабного когерентного вихря, ось которого направлена вдоль оси вращения. Данная теория позволяет определить крупномасштабный профиль скорости, а также статистические свойства течения, в частности, вычислить корреляционные [3], [6] и структурные функции [7] поля скорости.

Большой интерес представляет изучение трехмерных когерентных течений проводящей жидкости в магнитном поле, поиск параметров течений, при которых возможна самогенерация магнитного поля – эффект динамо [8]. Следствием генерации магнитного поля является наличие электродвижущей силы E , величина которой зависит от напряженности магнитного поля $\vec{B}$. Данное явление называется альфа-эффектом и количественно определяется линейной зависимостью между электродвижущей силой и напряженностью магнитного поля через псевдотензор $\hat{\alpha}$: $\vec{E} = \hat{\alpha}\vec{B}$ [9]. Зачастую альфа-эффект определяет самогенерацию магнитного поля, которая обеспечивает наличие магнитного поля у большинства астрономических объектов [8]. В связи с этим большой интерес представляет определение альфа-эффекта для трехмерного когерентного вихря проводящей жидкости в магнитном поле.

Целью данной работы является количественное определение величины альфа-эффекта для трехмерного когерентного вихревого течения проводящей жидкости. Посчитаны элементы псевдотензора альфа-эффекта, определена их зависимость от характеристик течения жидкости (вязкости, коэффициента диффузии, угловой скорости вращения и коэффициента сдвига). Альфа-эффект оказывается существенно анизотропным и зависит от соотношения между числом Россби и магнитным числом Прандтля.

Список литературы:

1. Hussain A. K. M. F. Coherent structures and turbulence //Journal of Fluid Mechanics. – 1986.
2. Kolokolov, I. & Lebedev, V. Structure of coherent vortices generated by the inverse cascade of two-dimensional turbulence in a finite box. Physical Review E, 93(3), 033104, 2016.
3. IV Kolokolov, LL Ogorodnikov, and SS Vergeles. Structure of coherent columnar vortices in three-dimensional rotating turbulent flow. Physical Review Fluids, 5(3):034604, 2020.

4. D.O. Staley and R.L. Gall «Hydrodynamic instability of Small Eddies in Tornado Vortex», Journal of the Atmospheric Sciences, Vol. 41, 3, (1983).
5. Schubert, G. «Treatise on geophysics», Volume 8, Core dynamics (2nd edition). Elsevier, 2015.
6. Л. Л. Огородников, С. С. Вергелес «Структура и пространственные корреляции столбчатых когерентных вихрей в трехмерной вращающейся жидкости», Забабахинские научные чтения, 2021.
7. Leon L Ogorodnikov and Sergey S Vergeles. Velocity structure function in a geostrophic coherent vortex under strong rotation. arXiv preprint arXiv:2112.05976, 2021.
8. Y.B. Zeldovich , A.A. Ruzmaikin, D.D. Sokolov Magnetic Fields in Astrophysics. N.Y.: Gordon and Breach, 1983. 364 p
9. E.N. Parker, 1955, The Astrophysical Journal 122, 293.

КОРРЕЛЯЦИОННЫЙ ИНТЕГРАЛ В ОЦЕНКЕ ЭФФЕКТИВНОСТИ СПЕКТРАЛЬНОГО МЕТОДА ОБНАРУЖЕНИЯ ПОВТОРОВ

А.Н. Панкратов, Н.М. Панкратова

*Институт математических проблем биологии РАН - филиал
Института прикладной математики им. М.В. Келдыша Российской
академии наук, pan@impb.ru, natpan1974@mail.ru*

В данной работе изучается метод обнаружения неточных повторов в сигналах различной природы, в частности, в символьных последовательностях, в которых могут использоваться алфавиты, состоящие из любого числа произвольно выбранных символов. Предложено сведение задачи обнаружения повторов в символьных данных к задаче обнаружения повторов в непрерывных числовых последовательностях, путем преобразования символьной последовательности в некоторое функциональное числовое представление, пригодное для применения методов аппроксимации данных. При этом важны полнота и непрерывность функционального представления. Полнота описания означает, что исходная последовательность может быть восстановлена по характеристическим кривым. Непрерывность необходима для применения методов аппроксимации сигналов. Доказана теорема о взаимно-однозначном представлении символьной последовательности пучком непрерывных функций дискретного аргумента. Для обнаружения и визуализации повторов используется точечная матрица сходства, которая

вычисляется на основе метрики в пространстве коэффициентов разложения фрагментов пучка функций.

Можно выделить существенные преимущества предложенного решения задачи обнаружения неточных повторов. Предложенный метод:

- сглаживает локальные неточности в повторах сигнала с помощью интегрального оценивания этих повторов;
- позволяет производить гибкое выравнивание неточных повторов за счет изменения размеров окна и его шага, т.е. выбора масштаба;
- использует спектральное разложение сигналов, что приводит к значительному сокращению вычислений;
- обладает высокой степенью векторизации и распараллеливания вычислений.

Данный метод подразумевает выбор параметров масштаба и чувствительности. Задача выбора параметров метода рассматривается на основе оценки корреляционного интеграла при различных значениях параметров для тестовых случайных последовательностей, содержащих случайным образом мутированные повторы. Показано, что при определенном выборе параметров неточные повторы могут быть практически идеально отделены от случайных повторов на генерализованной матрице сходства.

МОДЕЛИРОВАНИЕ РАЗВИТИЯ ПОПУЛЯЦИОННЫХ ИНВАЗИЙ С УЧЕТОМ СТОХАСТИЧЕСКИХ ВОЗМУЩЕНИЙ

А.Ю. Переварюха

СПб ФИЦ РАН, madelf@rambler.ru

Доклад посвящен моделированию экстремальных популяционных явлений. Инвазионные процессы генерируют чрезвычайно разнообразный и неожиданный характер смены этапов в своем развитии. Часто опасный вселенец переходит к фазе вспышке численности. Вспышка не означает, что чужеродный вид в итоге сформирует устойчивую популяцию. Отмечены случаи, когда быстро росшие в новом ареале колонии вселенцев внезапно резко сокращались или погибали. Чрезмерная плотность провоцирует отложенную во времени, но резкую по характеру ответную реакцию [1] со стороны антагонистического окружения (патогенных микроорганизмов или вирусов).

Цель работы – разработка модели сценария преодоления агрессивным вселенцем сопротивления местных соперничающих видов, которое способно вызвать состояние депрессии у формирующейся популяции. Для биосистемы с неустановившимся видовым составом актуальны специфические модификации уравнений инвазионных сценариев. Ряд факторов противодействия с пороговой зависимостью резко включаются только при высокой плотности, что мы учтем в новой модели. Специально выпускаемых антагонистов сейчас используют для целенаправленного противодействия вредным видам-пришельцам. Модель опишет популяционный кризис, когда депрессия вида резко начинается в фазе быстрого роста при активном сопротивлении биотического окружения.

Для моделей неравновесной популяционной динамики традиционные математические методы нужно целенаправленно модифицировать для новых возникающих задач. Проблема в этой области специфична потому, что не обосновано применение старших производных для режима колебаний.

Модели инвазии строились на базовых принципах регуляции популяций с репродуктивным потенциалом r и с действием запаздывания при ограниченном уровне емкости среды K : $N(t) > K$ если $N(0) < K$. Автором были объединены идеи популярных популяционных уравнений с использованием порогового значения численности, учета запаздывающей регуляции и стохастического возмущения величины запаздывания. Предложено следующее уравнение для численности:

$$\frac{dN}{dt} = rN(t - \tau) \exp(-bN(t - \tau_1 \times \gamma_1)) \frac{(K - N(t - \tau_2 \times \gamma))^2}{(K + N(t - \tau_2 \times \gamma))^3}. \quad (1)$$

В уравнении (1) используется равномерно распределенная случайная величина γ_1 для получения эффекта стохастического размывания сепаратрисы.

Список литературы:

1. Переварюха А.Ю. Запаздывание в регуляции популяционной динамики модель клеточного автомата// Динамические системы. 2017. № 2. С.157-165.

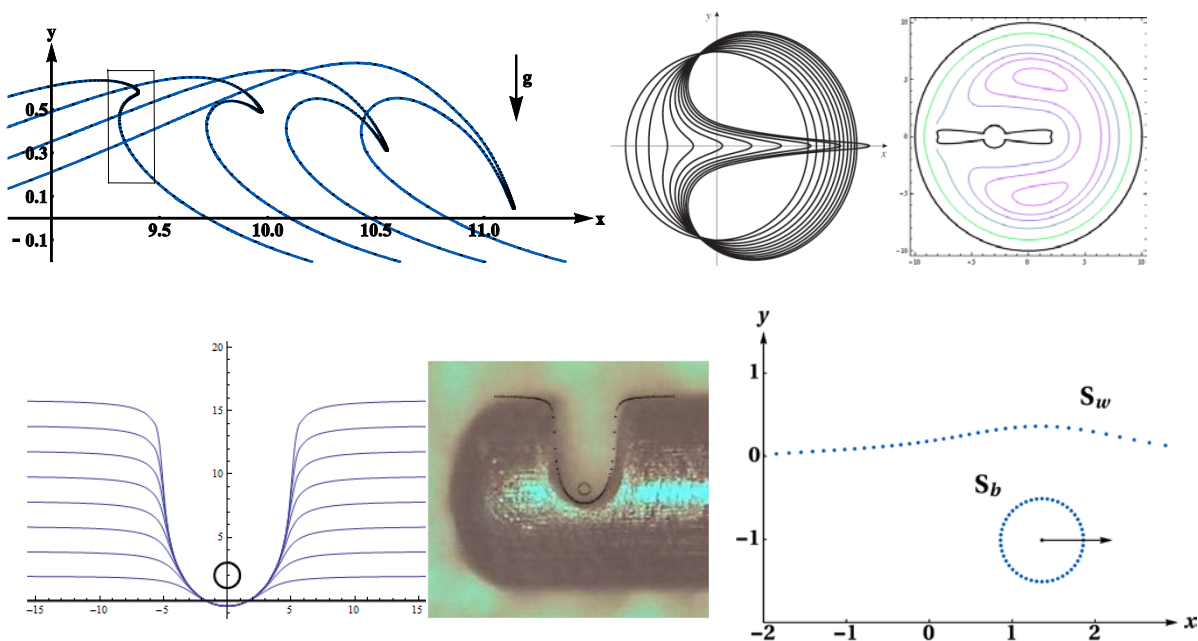
О ПРИМЕНЕНИИ СХЕМ С ЭКСПОНЕНЦИАЛЬНОЙ СХОДИМОСТЬЮ К РЕШЕНИЮ ЗАДАЧ ГИДРОДИНАМИКИ

А.Г. Петров

*Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского РАН,
petrovipmech@gmail.com*

Рассматривается широкий класс задач потенциальных течений жидкости в двумерных областях, ограниченных замкнутым контуром. Возникающие краевые задачи сводятся к интегральному уравнению на границе расчетной области. Граница является замкнутым контуром и определенные на ней функции имеют период, равный длине контура. Представлен алгоритм вывода квадратурных формул вычисления линейных операторов, действующих на периодические функции с экспоненциальным убыванием погрешности по числу элементов сетки. Применение выведенных квадратурных формул демонстрируются на решении ряда задач гидродинамики: обтекание решеток, задачи о кумуляции струй, обрушение волн, задачи течения вязкой жидкости в многосвязных областях, задачи теории упругости. На рисунках приведены решения задач: обрушение волны, кумуляции струй, модели миксера и поплавка и другие задачи. Расчеты можно проводить с любой заданной точностью.

Работа поддержана грантами РФФИ и NSFC № 21-57-53019 и РНФ № 22-21-00833.



Список литературы:

1. Петров А.Г. Алгоритм построения квадратурных формул с экспоненциальной сходимостью // Изв. ВУЗов. Математика. 2021. № 2.
2. Baykov N.D., Petrov A.G. On the plane-parallel motion of self-gravitating and rotating incompressible fluid with a free boundary // Euro. Jnl of Mech., B/Fluids. 2019 V 78. pp. 150-160.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ СТРУКТУРЫ ТЕМ-171 В-ЛАКТАМАЗЫ И ЕЕ КОМПЛЕКСОВ С ИНГИБИТОРАМИ

Т.Е. Петрова¹, В.Г. Григоренко², С. Carolan³, М.Ю. Рубцова²,
И.В. Упоров², J. Pereira³, G. Chojnowski³, В.Р. Самыгина^{4,5},
В.С. Ламзин³, А.М. Егоров²

¹*ИМПБ РАН филиал ИПМ им. М.В. Келдыша,
tania.petrova.ru@gmail.com*

²*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
химический факультет, vitality.grigorenko@gmail.com*

³*European Molecular Biology Laboratory, c/o DESY, Hamburg, Germany,
ciaran.carolan@gmail.com,
mrubtsova@gmail.com, iuporov@gmail.com, joana.pereira@unibas.ch,
gchojnowski@embl-hamburg.de,*

⁴*ФНИЦ "Кристаллография и фотоника" РАН*

⁵*НИЦ "Курчатовский институт", lera@crys.ras.ru
victor@lamzin.com, alex.m.egorov@gmail.com*

β-лактамазы – это группа бактериальных ферментов, которые способны разрушать β-лактамные антибиотики (к ним относятся, например, пенициллины и цефалоспорины). Продуцирование **β-лактамаз является основным механизмом постоянно возрастающей** устойчивости бактерий к этим антибиотикам. Задача поиска новых ингибиторов, связывающихся с β-лактамазами и блокирующих их активность, а также изучения механизмов их связывания с ферментами является очень актуальной. Методами рентгеноструктурного анализа были определены структуры нативной ТЕМ-171 β-лактамазы и двух ее комплексов с ингибитором тазобактамом [1]. Во всех структурах элементарная ячейка кристалла содержит шесть молекул фермента, степень упорядоченности которых очень сильно отличается. Необычная электронная плотность в структуре нативной ТЕМ-171 β-лактамазы около каталитического Ser70

была интерпретирована как группа молекул воды, образующих пирамидальную конструкцию и находящихся на необычно-близких расстояниях друг от друга (минимальное расстояние порядка 2.2 Å). В докладе обсуждаются проблемы интерпретации электронной плотности при построении атомной модели. В двух комплексах β -лактамазы с тазобактамом ингибитор ковалентно связан с остатком Ser70 активного центра фермента, но находится в разных конформациях и имеет разные контакты с ферментом. При этом, в этих комплексах конформационно отличается один из участков основной цепи β -лактамазы. Комплексы предположительно соответствуют разным этапам связывания ингибитора с ферментом.

ДВУХМАСШТАБНЫЙ ПОДХОД К МОДЕЛИРОВАНИЮ ПРОЦЕССОВ ГАЗОДИНАМИЧЕСКОГО НАПЫЛЕНИЯ

В.О. Подрыга¹, С.В. Поляков², Н.И. Тарасов³, В.А. Усачев⁴

¹*ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, pvictoria@list.ru*

²*ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, polyakov@imamod.ru*

³*ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, nikita_tarasov@imamod.ru*

⁴*МАДИ, ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, v.usachev99@list.ru*

Рассматривается моделирование процессов сверхзвукового холодного газодинамического напыления (СХГН) наночастиц на подложки [1]. Эта задача актуальна для реализации многих нанотехнологий, например, для производства видеосистем сверхвысокого разрешения, технологий нанолитографии [2] и др. Экспериментальные работы в данной области опираются на теоретический анализ и методы математического моделирования. Изучаются как сам процесс напыления, так и возможности управления качеством получаемой поверхности. Для этого часто применяется многомасштабный подход, сочетающий модели механики сплошной среды и модели частиц, что позволяет описать макроскопические свойства газового потока, несущего наночастицы, и его взаимодействие с подложкой на уровне отдельных атомов и молекул. В данной работе макромасштабной моделью служат уравнения квазигазодинамики [3], микромасштабной – уравнения молекулярной динамики (МД) [4]. Эти два подхода используются как по отдельности, так и совместно. Для анализа полного цикла процесса напыления (то есть рассмотрения процесса на макро- и микромасштабах) предложен оригинальный набор алгоритмов сопряжения соответствующих математических описаний. При этом различается получение покрытий при осаждении из газовой

фазы и обработка поверхности направленным сверхзвуковым потоком газа. Сложность такого моделирования заключается в том, что процессы напыления слабо контролируемы и протекают в мало известных реальных условиях, например, при отсутствии твердых знаний о механизмах взаимодействия отдельных наночастиц, а также уравнений состояния многофазной газовой среды. Эти неизвестные данные удастся получить при использовании прямого МД моделирования.

Работа поддержана грантом РФФИ № 21-71-20054.

Список литературы:

1. Алхимов А.П., Клинков С.В., Косарев В.Ф., Фомин В.М. Холодное газодинамическое напыление. Теория и практика. - М.: Физматлит, 2010.
2. Resnick D. Nanoimprint lithography / In: Nanolithography. The art of fabricating nanoelectronic and nanophotonic devices and systems, edited by Martin Feldman, Woodhead Publishing Limited, 2014.
3. Elizarova T.G. Quasi-gasdynamic equations. Springer, 2009.
4. Haile J.M. Molecular Dynamics Simulations. Elementary Methods. NY: John Wiley & Sons Inc., 1992.

МНОГОМЕРНЫЙ СТАТИСТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ ПРОСТРАНСТВЕННЫХ СТРУКТУР ДНК В КОМПЛЕКСАХ ГОМЕОДОМЕННЫЙ БЕЛОК - ДНК

Р.В. Полозов¹, Т.И. Грохлина², Л.А. Панченко³, В.В. Иванов⁴

¹*Институт теоретической и экспериментальной биофизики РАН,
Пушкино, Россия, polrob@mail.ru*

²*ИМПБ РАН – филиал ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, Пушкино, Россия*

³*Биологический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия*

⁴*Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия*

Процессы ассоциации и диссоциации белков, факторов транскрипции, с ДНК являются основой регуляции транскрипции. Факторы транскрипции эукариот собраны эволюцией в семейства, которые регулируют различные процессы функционирования клеток организма. Семейство гомеодоменных белков регулирует процессы дифференцировки и пролиферации клеток. В области интерфейса (белок-ДНК) двойная спираль и геометрия нуклеотидов деформируются. Мера деформации зависит от нуклеотидной

последовательности ДНК в области интерфейса и специфична для каждого комплекса. Геометрия и размер широкого желоба, типы аминокислот, специфические атом-атомные контакты между узнающей альфа-спиралью и ДНК, связность атомных групп в интерфейсе - это основные характеристики биомолекулярного узнавания. Применение методов многомерного статистического анализа пространственных структур интерфейсов является целью работы. Для анализа данных мы использовали дисперсионный анализ, методы ANOVA и непараметрические критерии - Крускала-Уоллиса, Брауна-Муда. Для решения задач классификации были выбраны четыре группы геометрических параметров с использованием пакета 3DNA, предназначенного для анализа, реконструкции и визуализации трехмерных структур нуклеиновых кислот [1, 2]. Кластерный анализ разбивает исходную выборку на четыре класса. Дискриминантный анализ показал, что значение вероятности корректной классификации равно ~99%. Результаты классификации приведем в кратком резюме: семейство гомеодоменных белков и их комплексов с ДНК имеет детерминированную и псевдослучайную компоненты. Детерминированная компонента соответствует структурным и физико-химическим аспектам проблемы узнавания, а псевдослучайная компонента - эволюционным и информационным аспектам.

Список литературы:

1. Lu X-J, Olson W.K. Nucleic Acids Res. 2003, vol. 31, 5108–5121. DOI: [10.1093/nar/gkg680](https://doi.org/10.1093/nar/gkg680).
2. Lu X-J, Olson W.K. Computational Crystallography Newsletter 2016, vol. 7, 6–9

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭМИССИОННЫХ ПРОЦЕССОВ В СИЛЬНЫХ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ПОЛЯХ

**С.В. Поляков¹, Е.А. Галстьян², Н.И. Тарасов³,
Т.А. Кудряшова⁴**

¹ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, polyakov@imamod.ru

²ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, e_galstyan@mail.ru

³ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, nikita_tarasov@imamod.ru

⁴ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, kudryashova@imamod.ru

С развитием нанотехнологий в последние годы большой интерес проявляется к моделированию эмиссионных процессов с поверхности

металлов. Это связано с использованием мощных электронных и ионных пучков в задачах напыления тонких пленок и нанолитографии. В данной работе рассмотрена проблема расчета процессов электронной эмиссии с поверхности металлов при сильных электромагнитных полях с учетом релятивистских эффектов. Одним из методов моделирования в данной области является метод частиц в ячейках, сочетающийся с сеточным расчетом полей на основе уравнений Максвелла. Подобные методики развиваются с 1960х годов по настоящее время (см., например [1-4]). При этом существующие подходы все еще имеют определенные ограничения. В нашей работе для аксиально-симметричной геометрии технической системы представлена численная методика расчета эмиссии электронов из стальных и графитовых электродов. Методика использует представление крупных сглаженных гауссовых частиц и реализует расчеты полей на криволинейных пространственных сетках. Программная реализация выполнена в параллельном варианте с использованием стандарта OpenMP. В качестве тестовых задач были выбраны коаксиальный диод и электроды сложной геометрической формы. В расчетах в рамках первой задачи были получены характеристики пучка электронов, соответствующие аналитической зависимости тока от напряжения Чайлда-Ленгмюра. В расчетах по второй задаче при задании сильного продольного магнитного поля был воспроизведен федосовский ток [5]. Таким образом, разработанная численная методика оказалась достаточно эффективной.

Работа поддержана грантом РФФИ № 21-71-20054.

Список литературы:

1. Митра Р. (ред.). Вычислительные методы в электродинамике. - М.: Мир, 1977.
2. Tarakanov V.P. User's Manual for Code Karat. BRA, Springfield, 1992.
3. Григорьев Ю.Н., Вшивков В.А., Федорук М.П. Численное моделирование методами частиц в ячейках. - Новосибирск, Изд-во СО РАН, 2004.
4. Jianguo Wang, Dianhui Zhang, Chunliang Liu et al. // Physics of Plasmas 2009, 16, 033108, pp. 1-11.
5. Громов А.В., Гойхман М.Б., Ковалев и др. // Письма в ЖТФ 2018, 44(20). С. 102-110.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ОБТЕКАНИЯ КРУГОВОГО ЦИЛИНДРА ВБЛИЗИ РАЗМЫВАЕМОЙ ДОННОЙ ПОВЕРХНОСТИ

И.И. Потапов¹, А.Г. Петров², А.С.Епихин³, **А.Д. Бритов³**

¹*Вычислительный центр Дальневосточного отделения РАН: Хабаровск*

²*Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского РАН: Москва*

³*Институт системного программирования им. В.П. Иванникова РАН :
Москва*

В работе предложена модифицированная формула расхода влекомых наносов для дна, имеющего высокие уклоны. Показаны причины по которым традиционный подход учета уклонов дна при расчете критических касательных напряжений, применяющихся при расчетах донных деформации, дает заниженные значения размыва донной поверхности под цилиндром.

Для расчета гидродинамических характеристик использовался программный комплекс OpenFOAM. После нахождения напряжений на дне определяется величина донных деформаций и расчет гидродинамики повторяется. Результаты моделирования сравнивались с экспериментальными данными [1]. Размыв гидродинамическим потоком несвязного дна под трубопроводом показан на рисунке 1.

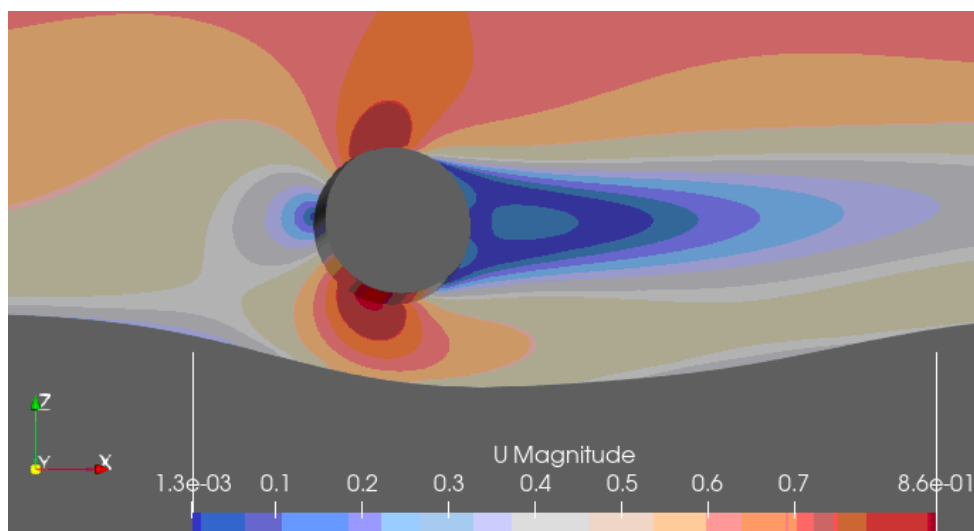


Рис.1. Размыв дна под цилиндром

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и ГФЕН в рамках научного проекта № 21-57-53019.

Список литературы:

1. Zhao, M., & Cheng, L. (2008). Numerical modeling of local scour below a piggyback pipeline in currents. *Journal of Hydraulic Engineering*, 134(10), 1452-1463. [https://doi.org/10.1061/\(ASCE\)0733-9429\(2008\)134:10\(1452\)](https://doi.org/10.1061/(ASCE)0733-9429(2008)134:10(1452))

РАЗВИТИЕ БЕРЕГОВОГО ОТКОСА В РУСЛЕ ТРАПЕЦИЕВИДНОГО КАНАЛА

Д.И. Потапов¹, И.И. Потапов²

*¹ Институт горного дела Дальневосточного отделения
Российской академии наук, shineon91@mail.ru*

*² Вычислительный центр Дальневосточного отделения
Российской академии наук, potapov2i@gmail.com*

Сформулирована математическая модель эрозии берегового склона песчаного канала, происходящей под действием проходящей паводковой волны. Модель включает в себя уравнение движения квазиустановившегося гидродинамического потока в створе канала. Движение донной и береговой поверхности русла определяется из решения уравнения Экснера, которое замыкается оригинальной аналитической моделью движения влекомых наносов. Модель учитывает транзитные, гравитационные и напорные механизмы движения донного материала, и не содержит в себе феноменологических параметров. Движение свободной поверхности гидродинамического потока определяется из решения дифференциальных уравнений баланса. Модель учитывает изменения средней по створу турбулентной вязкости при изменении створа канала.

На основе метода конечных элементов получен дискретный аналог сформулированной задачи и предложен алгоритм ее решения. Особенностью алгоритма является контроль влияния движения свободной поверхности потока и расхода потока на процесс определения турбулентной вязкости потока в процессе эрозии берегового склона. Проведены численные расчеты, демонстрирующие качественное и количественное влияние данных особенностей на процесс определения турбулентной вязкости потока и эрозию берегового склона русла.

Сравнение данных по береговым деформациям, полученных в результате численных расчетов, с известными лотковыми экспериментальными данными показали их согласование.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 21-57-53019).

ВЛИЯНИЕ ГЕОМЕТРИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ НА ТОЧНОСТЬ ИНТЕРПОЛЯЦИЙ ФУНКЦИЙ В МЕТОДЕ SPH

И.И. Потапов¹, О.В. Решетникова²

¹ *Вычислительный центр Дальневосточного отделения РАН,
Хабаровск, potapov2i@gmail.com*

² *Вычислительный центр Дальневосточного отделения РАН,
Хабаровск, ov13r@yandex.ru*

В работе выделены два геометрических параметра, влияющих на интерполяцию физических величин в методе SPH. Это коэффициент сглаживания, связывающий размер частицы с величиной радиуса сглаживания, и коэффициент объема, позволяющий корректно определять массу частиц при заданном их распределении в расчетном объеме.

Предложена методика оценки влияния означенных параметров на точность интерполяций в методе SPH при решении гидростатической задачи. Для оценки точности вводятся две аналитические функции относительной погрешности интерполяции: плотности и градиента давления в среде. Функции относительной погрешности имеют аргументами коэффициент сглаживания и коэффициента объема. Выбор вида интерполяции позволяет преобразовать дифференциальную форму функций погрешности к форме алгебраического полинома. Корни такого полинома дают значения коэффициента сглаживания, обеспечивающие минимальную погрешность соответствующей интерполяции при заданном коэффициенте объема.

В работе осуществлены вывод и анализ функций относительных погрешностей плотности и градиента давления на выборке популярных ядер с различными радиусами сглаживания. Установлено, что для всех рассмотренных ядер не существует общего значения коэффициента сглаживания, обеспечивающего минимальную погрешность обеих SPH-интерполяций. Выделены представители ядер с различными радиусами сглаживания, позволяющие обеспечить наименьшие погрешности SPH-интерполяций при решении гидростатической задачи. Также определены некоторые ядра, не позволяющие обеспечить корректное

интерполирование при решении гидростатической задачи методом SPH.

Список литературы:

1. Потапов И.И., Решетникова О.В. Исследование влияния двух геометрических параметров на точность решения гидростатической задачи методом гидродинамики сглаженных частиц // Компьютерные исследования и моделирование. 2021 . Т. 13. № 5. С. 979–992.

О РАЗВИТИИ ВОЛНОВЫХ ВОЗМУЩЕНИЙ ДОННОЙ ПОВЕРХНОСТИ В РЕКАХ И КАНАЛАХ

И.И. Потапов¹, Ю.Г. Силакова¹

¹Вычислительный центр ДВО РАН, potapov2i@gmail.com

²Вычислительный центр ДВО РАН, krat_yuliya@mail.ru

На основе аналитической модели расхода влекомых наносов, учитывающей влияние уклонов донной поверхности, придонных нормальных и касательных напряжений на движение донного материала [1] и аналитического решения, позволяющего определять придонные касательные и нормальные напряжения [2], возникающие при обтекании турбулентным потоком периодических длинных донных волн малой амплитуды, сформулирована и решена задача определения скорости роста амплитуды донной волны. Из решения задачи получена аналитическая зависимость, определяющая скорость роста амплитуды донных волн от текущего значения ее амплитуды. На примере развития периодической синусоидальной донной волны малой крутизны выполнена верификация, которая показала хорошее качественное и количественное согласование полученного решения с экспериментальными данными [3].

Список литературы:

1. Петров А.Г., Потапов И.И. Перенос наносов под действием нормальных и касательных придонных напряжений с учетом уклона дна // Прикладная механика и техническая физика 2014 Т. 55 № 5 С. 100-105.
2. Петров А.Г., Потапов И.И. Моделирование обтекания турбулентным потоком периодической донной поверхности // Изв. РАН. Физика атмосферы и океана 2017 Т. 53 № 3 С. 415-421.

3. Fourriere A., Claudin Ph., Andreotti B. Bedforms in a turbulent stream: formation of ripples by primary linear instability and of dunes by nonlinear pattern coarsening // Journal of Fluid Mechanics 2010 V. 649 P. 287-328.

ОБ АЛГОРИТМЕ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ МЕЛКОЙ ВОДЫ МЕТОДОМ ЦЕНТРАЛЬНЫХ РАЗНОСТЕЙ С КОРРЕКЦИЕЙ FCT

И.И. Потапов¹, П.С. Тимош²

¹ ВЦ ДВО РАН, potapov2i@gmail.com

² ВЦ ДВО РАН, pavel.timosh@yandex.ru

Предлагается метод решения плановой задачи мелкой воды, реализованный на основе центрально-разностной по пространству и явной одно шаговой по времени схемы, устойчивость которой обеспечивается методом FCT.

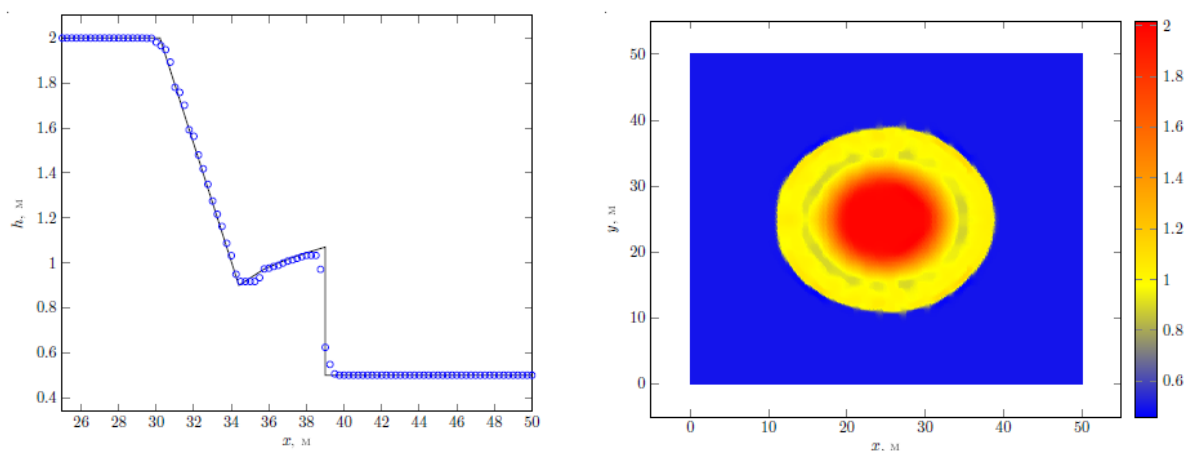


Рис. 1. Результаты численного решения задачи

Тестирование метода проведено на задаче об изменении уровня свободной поверхности при разрушении цилиндрического столба несжимаемой невязкой жидкости в мелком бассейне. Полученные численные результаты рис.1. сравнивались с известными данными и решением, полученным методом Мак-Кормака. Сравнение показало, что предложенный метод, при сравнимой точности решения с методом Мак-Кормака, превосходит последний в скорости вычислений.

О ПОРОГОВЫХ ЯВЛЕНИЯХ ДЛЯ УРАВНЕНИЙ ЭЙЛЕРА-ПУАССОНА

О.С. Розанова

МГУ им.М.В. Ломоносова, rozanova@mech.math.msu.su

Мы рассматриваем систему уравнений Эйлера-Пуассона без давления использующихся для описания, в зависимости от типа взаимодействия, процессы астрофизики или физики плазмы. Известно, что решения задачи Коши для таких уравнений могут со временем разрушаться. Очень интересной и трудной задачей является разделение начальных данных на классы. Начальные данные из одного класса приводят к разрушению решения, а данные из другого класса соответствуют глобально гладкому по времени решению. В редких случаях такое разделение можно произвести точно. Когда под действием какого-либо параметра характер решения меняется с глобально гладкого на разрушающийся, говорят о пороговом явлении. Мы покажем, что в роли параметра, при помощи которого можно управлять пороговыми явлениями, может выступать интенсивность трения между частицами [1]. Кроме того, мы покажем, что в пространстве многих переменных начальные данные разделяются на классы совершенно отлично от того, как это происходит в пространстве одной переменной [2].

Работа поддержана МЦ Фундаментальной и прикладной математики, проект 075-15-2019-1621

Список литературы:

1. Rozanova O.S. // Physica D: Nonlinear Phenomena, 2022, V.429, 133077.
2. Rozanova O.S. // arXiv:2201.11099.

PSSKB: БАЗА ЗНАНИЙ СТРУКТУРНЫХ МОТИВОВ БЕЛКОВ

**В.Р. Руднев^{1,2}, Д.В. Петровский², К.С. Никольский²,
Л.И. Куликова^{3,1}, А.В. Ефимов⁴, А.Л. Кайшева²**

¹*Институт теоретической и экспериментальной биофизики РАН,
volodyarv@mail.ru*

²*Научно-исследовательский институт биомедицинской химии имени
В.Н.Ореховича, petro2017@mail.ru, glucksistemi@gmail.com,
kaysheva1@gmail.com*

³*Институт математических проблем биологии РАН – филиал ИПМ
им. М.В. Келдыша РАН, likulikova@mail.ru*

⁴*Институт белка РАН, efimov@protres.ru*

Данная работа посвящена созданию базы знаний белковых структурных мотивов, имеющих уникальные укладки полипептидной цепи в пространстве и являющихся зародышами или готовыми структурными блоками в процессе сворачивания белков. Всесторонне изучение структурных мотивов в белках крайне актуально и важно для понимания принципов укладки полипептидной цепи в пространственные структуры. Полученные знания могут быть весьма полезны для решения фундаментальных (теоретическое предсказание пространственной структуры белковых молекул, моделирование структуры белков) и прикладных (разработка новых подходов к диагностике заболеваний и идентификация мишеней для лекарств) проблем.

В ходе работы была создана база данных структурных мотивов белковых молекул с помощью искусственного интеллекта для поиска, распознавания и классификации типов супервторичных структур белков. База данных объединяет сервисы хранения данных и вычислительные алгоритмы для их анализа с возможностями графического представления данных отдельной структуры, а также статистической обработки выборки отсортированных структурных мотивов. База знаний включает в себя: онлайн-сервис проведения молекулярно-динамических расчетов для белковых структур для исследования стабильности; технологию проведения посттрансляционного модифицирования белков, ассоциированных с развитием широкого спектра патологий, и аминокислотных замен в белках.

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных научных исследований в Российской Федерации на долгосрочный период (2021–2030 годы).

Список литературы:

1. A.T. Kopylov, D.V. Petrovsky, A.A. Stepanov, V.R. Rudnev et al. // Journal of Biomedical Informatics, 2021, V. 122, 103890.
2. V.R. Rudnev, L.I. Kulikova, K.S. Nikolsky, K.A. Malsagova, A.T. Kopylov and A.L. Kaysheva. // International Journal of Molecular Sciences. 2021, V. 22, 11879.

ИССЛЕДОВАНИЕ КОРРЕЛЯЦИЙ МЕЖДУ КОМПАРТМЕНТАМИ МОЗГА МЕТОДОМ ВИРТУАЛЬНЫХ ЭЛЕКТРОДОВ

С.Д. Рыкунов¹, А.И. Бойко¹, М.Н. Устинин¹

¹ *ИМПБ РАН - филиал ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, Пущино,
rykunov@impb.ru*

Предложен новый метод для изучения корреляции между частями головного мозга человека по данным магнитной энцефалографии. Временные ряды для корреляционного анализа генерируются при помощи метода виртуальных электродов. На первом этапе многоканальные магнитные энцефалограммы субъектов с подтвержденным диагнозом дефицита внимания и гиперактивности преобразуются в функциональные томограммы – пространственное распределение источников магнитного поля на дискретной сетке. Это достигается решением обратной задачи для всех элементарных осцилляций, выделяемых с помощью преобразования Фурье. Каждой частоте соответствует узел трехмерной сетки, в котором располагается токовый диполь, осциллирующий с данной частотой. Виртуальный электрод представляет собой область пространства, активность которой предполагается изучать. Временная зависимость этой активности получается суммированием спектральной мощности всех источников, попадающих в область виртуального электрода. Для апробации метода в данной статье были выбраны десять основных компартментов мозга, таких, как лобная доля, теменная доля, затылочная доля и другие. Каждому компартменту соответствует виртуальный электрод, построенный по магнитно-резонансной томограмме субъекта. Изучались попарные корреляция между этими компартментами в полосах частот, соответствующих четырем ритмам мозга: тэта, альфа,

бета и гамма. Длительность временных рядов мощности каждого электрода составила 300 секунд. Был рассчитан коэффициент корреляции между мощностями на эпохе в одну секунду, усредненный по всем эпохам. Результаты представлены в виде матриц, отображающих попарные корреляции. Метод может быть использован для изучения корреляции между сигналами, генерируемыми произвольными частями мозга в любом спектральном диапазоне.

Список литературы:

1. Устинин М.Н., Рыкунов С.Д., Бойко А.И. Корреляция между компартментами мозга при синдроме дефицита внимания и гиперактивности, рассчитанная методом виртуальных электродов по данным магнитной энцефалографии // Математическая биология и биоинформатика. 2020; Т. 15 №2, С. 471-486 doi: 10.17537/2020.15.471

ОПРЕДЕЛЕНИЕ СТРУКТУРЫ ДВИЖЕНИЯ ЖИДКОСТИ ПРИ ВВЕДЕНИИ ЛЕКАРСТВА В ГЛАЗ ПОСРЕДСТВОМ УКОЛА

**С.А. Складчиков, Н.П. Савенкова, В.С. Лапонин,
С.В. Анпилов**

МГУ им. М.В. Ломоносова, факультет вычислительной математики и кибернетики, кафедра вычислительных методов. skladtchikov@mail.ru

В настоящее время актуальным и перспективным направлением в научных исследованиях является численное изучение физиологических, патологических и биологических процессов, происходящих в организме человека. На сегодняшний день медицина представляет собой экспериментальную науку, которая на основе констатации фактов клинических операций и их последствий, проявляющихся в организме человека. В этом плане построение математических моделей необходимо для изучения процессов, протекающих в организме человека.

В работе проведено математическое моделирование при измененных физических характеристиках вещества стекловидного тела глаза человека. Была проведена серия численных экспериментов при которых менялась плотность и вязкость стекловидного тела по сравнению с базовым расчетом (плотность и вязкость стекловидного тела соответствуют плотности и вязкости воды). По результатам проведенных расчетов можно сделать следующие выводы:

- Вязкость стекловидного тела оказывает решающее влияние на

время нахождения лекарства в задней камере глаза. Увеличение вязкости вплоть до 3х раз является, с точки зрения медицины, вполне реалистичной ситуацией с увеличением возраста пациента.

- Структура течения лекарственного вещества в задней камере глаза соответствует структуре тороидального вихря с твердотельным ядром вращения. Механизмы самоподдержания такой структуры движения позволяют лекарственному веществу дольше находиться в задней камере глаза.

Список литературы:

1. Yusupaliev U., Savenkova N.P., Troshchiev Y. V., Shuteev S.A., Skladchikov S.A., Vinke E.E., Gusein-zade N.G. // Vortex rings and plasma toroidal vortices in homogeneous unbounded media. ii. the study of vortex formation process / // Bulletin of the Lebedev Physics Institute, 2011, V. 38, P. 275–282.
2. Savenkova N.P., Anpilov S.V., Kuzmin R.N., Provorova O.G., Piskazhova T.V. / Reduction cell multiphase 3d model / // Applied Physics, 2012, no. 3, P. 111–115.
3. Savenkova N., Laponin V. A numerical method for finding soliton solutions in nonlinear differential equations // Moscow University Computational Mathematics and Cybernetics, 2013, V. 37, no. 2, P. 49–54.

РАСЧЕТ АЭРОДИНАМИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ЭЛЛИПТИЧЕСКИХ ПРОФИЛЕЙ ПОЛУАНАЛИТИЧЕСКИМ МЕТОДОМ

**А.Д. Сухов¹, А.Г. Петров², И.Н. Сибгатуллин³,
А.С. Епихин⁴**

¹*ИИМех РАН, sukhov.ad@phystech.edu*

²*ИИМех РАН, petrivi@mech@gmail.com*

³*ИСП РАН, ilias.sibgat@gmail.com*

⁴*ИСП РАН, andreypikhin@ispras.ru*

Рассмотрена плоская задача о вязком ламинарном обтекании эллиптических цилиндров под углом атаки. Путем решения уравнений ламинарного пограничного слоя методом локального подобия Лойцянского находятся касательные напряжения на границе эллипса и в точках отрыва. Из равенства скоростей в точках отрыва находится циркуляция и строится полное решение задачи о полях скорости и

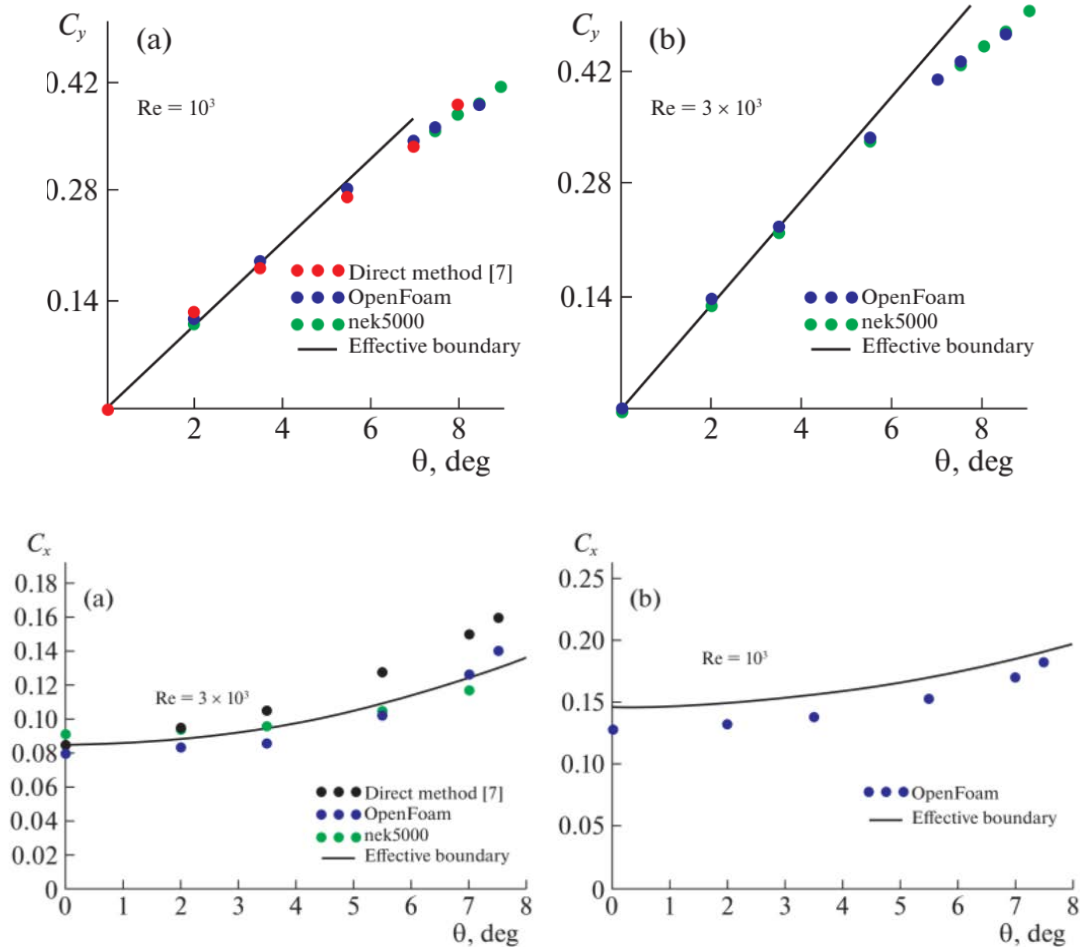
давления вне пограничного слоя. Найдены коэффициенты подъемной силы и сопротивления в зависимости от угла атаки и соотношения осей эллипса. Теоретические результаты сравниваются с имеющимися экспериментальными данными и прямыми численными решениями уравнений Навье--Стокса. Для коэффициентов сопротивления и подъемной силы получены интерполяционные формулы как функции отношений осей эллипса, угла атаки и числа Рейнольдса. Данное исследование выполнено при поддержке РФФИ и NSFC, номера проекта 21-57-53019.

$$C_x = -0.07 + 0.95b_{el} - 1.25b_{el}^2 + 0.001\theta^2 +$$

$$+ \left(400b_{el}^2 - 111.6b_{el} + 8.82\right)\sqrt{\frac{1}{Re}} + (-8700b_{el}^2 + 2940b_{el} - 162)\frac{1}{Re},$$

$$C_y = -3.81b_{el}^2 + 0.9945b_{el} + 0.02165 +$$

$$+ \left(472.44b_{el}^2 - 142.5b_{el} + 9.112\right)\sqrt{\frac{1}{Re}} + (-10080b_{el}^2 + 3081b_{el} - 213.3)\frac{1}{Re}.$$



На рисунках показаны сопоставления интерполяционных формул с численными расчетами.

Список литературы:

1. A. G. Petrov, A. D. Sukhov, and I. N. Sibgatullin, Laminar Flow of Viscous Fluid Around Elliptical Contours at an Angle of Attack// Lobachevskii Journal of Mathematics, 2022, Vol. 43, No. 5, pp. 1188–1198.

ИССЛЕДОВАНИЕ НЕЛИНЕЙНОГО ПОГЛОЩЕНИЯ АЛЬФВЕНОВСКОЙ ВОЛНЫ С УЧЁТОМ НЕОДНОРОДНОСТИ

А.А. Таюрский¹

¹ИИПМ им. М.В. Келдыша РАН, tayurskiy2001@mail.ru

В докладе численно исследовано нелинейное поглощение плоской альфвеновской волны, падающей на неподвижную границу диссипативной неоднородной плазмы, обусловленное магнитной вязкостью, гидродинамическими вязкостями и теплопроводностями электронов и ионов, тормозным, фоторекомбинационным и синхротронным излучениями и обменом энергией между плазменными компонентами. Рассмотрены неоднородности по плотности, заданные при помощи гауссова распределения. Данное исследование обусловлено предложенным рядом авторов в 2011 г. механизмом разогрева солнечной короны и генерации солнечного ветра как результата затухания в плазме альфвеновских волн, генерируемых в нижних, значительно более холодных солнечных слоях. В основу исследования положены уравнения двухжидкостной электромагнитной гидродинамики с полным учётом инерции электронов. Предложенная неявная разностная схема расчёта плоскопараллельных течений двухжидкостной плазмы позволила выявить ряд важных закономерностей поглощения. В частности, показано, что зависимость поглощения с учётом тормозного и фоторекомбинационного излучений для неоднородной плазмы приводит к эффекту запираания альфвеновской волны в диссипативной плазме и возникновению квазистационарного режима поглощения альфвеновской волны. Получены зависимости глубины проникания альфвеновской волны и максимальных температур электронов и ионов от размеров неоднородности по плотности.

Список литературы:

1. Гавриков М.Б., Таюрский А.А. Пространственное нелинейное затухание альфвеновских волн в диссипативной плазме // Математическое моделирование. 2013. Т.25. №8. С.65-79.

**ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ИТЕРАЦИОННЫХ МЕТОДОВ ПРИ
ЧИСЛЕННОМ РЕШЕНИИ ТРЕХМЕРНОЙ ЗАДАЧИ
ГЕНЕРАЦИИ ЛАЗЕРО-ИНДУЦИРОВАННОЙ
ПОЛУПРОВОДНИКОВОЙ ПЛАЗМЫ**

V.A. Trofimov¹, М.М. Логинова², В.А. Егоренков²

¹*South China University of Technology, Guangzhou, China*

²*Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова,
Москва, Россия*

В докладе обсуждаются численные методы для решения задачи прохождения лазерного импульса через полупроводник. Математическая постановка задачи представляет собой систему трехмерных нестационарных дифференциальных уравнений в частных производных, записанных относительно характеристик полупроводника и уравнения, описывающего изменения интенсивности оптического импульса. Особенностью системы является существование нелинейной обратной связи между концентрацией свободных электронов и потенциалом электрического поля. Наличие нелинейного поглощения энергии оптического излучения дает возможность реализации оптической бистабильности.

В настоящее время для решения нелинейных нестационарных задач широко применяются методы расщепления. Одним из наиболее распространенных подходов для решения трехмерных нелинейных задач является метод стабилизирующей поправки, предложенный в [1, 2]. Нами предложен альтернативный вариант - оригинальный трехэтапный итерационный процесс для реализации консервативной, асимптотически устойчивой и экономичной разностной схемы, построенный на основе конечно-разностной схемы типа Кранка-Николсона [3]. Данный метод сочетает в себе экономичность методов расщепления и, в то же время, обеспечивает консервативность схемы и асимптотическую устойчивость при проведении расчетов на больших временных интервалах. Сравнение методов проводится на основе результатов компьютерного моделирования рассматриваемой задачи.

Отдельно рассматривается вопрос выбора численного метода для решения задачи Неймана для уравнения Пуассона, записанного относительно потенциала светоиндуцированного электрического поля полупроводника. Продемонстрировано преимущество итерационных методов перед прямыми методами, так как использование последних приводит к нарушению условия разрешимости задачи Неймана в анализируемой системе уравнений.

2.

Список литературы:

1. Douglas J., Rachford H. H. On the numerical solution of heat conduction problems in two and three space variables // Transactions of the American mathematical Society. 1956. V. 82 (2), P. 421-439.
2. Douglas J. Alternating direction methods for three space variables // Numerische Mathematik. 1962. V. 4 (1), P. 41-63.
3. Trofimov V.A., Loginova M.M., Egorenkov V.A. Conservative finite-difference scheme for computer simulation of contrast 3D spatial-temporal structures induced by a laser pulse in a semiconductor // Mathematical Methods in the Applied Sciences. 2020. V.43 (7), P. 4895–4917.

СВОЙСТВА ДИСКРЕТНЫХ АНАЛОГОВ СМЕШАННОЙ ПОСТАНОВКИ НА БАЗЕ РАЗРЫВНОГО МЕТОДА ГАЛЁРКИНА ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ ДАРСИ

С.А. Трофимова^{1,2}, Н.Б. Иткина¹, Э.П. Шурина^{1,2}

¹*Новосибирский государственный технический университет*

²*Институт нефтегазовой геологии и геофизики им. А.А. Трофимука
СО РАН, svetik-missy@mail.ru*

Развитие технологий интенсификации (гидравлический разрыв пласта) и разработки месторождений углеводородов требует применения современного аппарата математического моделирования процесса фильтрации флюида в гетерогенной геологической среде. Специфика прикладной области обуславливает использование специализированных смешанных вариационных постановок [1]. При решении задач в сложно построенных геологических областях разрывный метод Галёркина имеет преимущества перед стандартным методом конечных элементов [2]. Однако стоит отметить, что основной особенностью дискретных аналогов неконформных смешанных вариационных постановок для задачи Дарси с тензорным коэффициентом проницаемости среды является вычислительная

неустойчивость. Повышение устойчивости таких схем достигается за счёт дополнительной стабилизации вариационной постановки, выбора специального базиса или специального решателя.

В данной работе выполняется построение смешанной неконформной вычислительной схемы для решения задачи Дарси с тензорным коэффициентом проницаемости среды, проводится конструирование базисных систем в соответствующих функциональных пространствах, анализируются свойства матриц дискретного аналога.

Работа выполнена при финансовой поддержке проекта ФНИ № 0266-2022-0030, проекта ФНИ № 0266-2022-0025.

Список литературы:

1. Brezzi F., Hughes T.J.R., Marini L.D., Masud A. Mixed discontinuous Galerkin methods for Darcy flow. // Journal of Scientific Computing. 2005. Vol. 22. No. 1. P. 119-225.
2. Arnold D.N., Brezzi F., Cockburn B., Marini L.D. Unified analysis of discontinuous Galerkin methods for elliptic problems. // SIAM J. Numer. Anal. 2002. Vol. 39. No. 5. P. 1749-1779.

РЕКОНСТРУКЦИЯ ФУНКЦИОНАЛЬНОЙ СТРУКТУРЫ ТЕЛА ЧЕЛОВЕКА ПО ДАННЫМ МНОГОКАНАЛЬНЫХ ИЗМЕРЕНИЙ

М.Н. Устинин¹, С.Д. Рыкунов¹, А.И. Бойко¹

¹*ИМПБ РАН – филиал ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, u_m_n@mail.ru*

Предложен новый подход к реконструкции электрической активности человеческого тела по многоканальным записям внешнего магнитного поля – метод функциональной томографии. Этот подход основан на детальном частотном анализе и выделении частотных компонент с высокой когерентностью и похожими паттернами. Математические основы метода состоят в следующей последовательности операций: - прямое преобразование Фурье полного временного ряда; - обратное преобразование Фурье на каждой частоте; - выделение независимых компонент полученного сигнала; - разбиение экспериментального пространства на элементарные ячейки с нужным разрешением; - генерация множества пробных источников (до ста миллионов) в принятой физической модели; - решение обратной задачи для каждой независимой компоненты методом полного перебора. В

результате выполнения этого алгоритма строится массив функциональной томограммы размером $N \times M$, где N (число независимых компонент) – несколько десятков тысяч, а M равно 7 и содержит информацию о номере компоненты, частоте, номере ячейки в пространстве, спектральной мощности, направлении и амплитуде элементарного источника, а также о качестве решения обратной задачи. Эту томограмму можно представить в воксельном виде, где координаты вокселя определяются его положением в пространстве датчиков поля, а яркость – суммой энергий или амплитуд источников поля, расположенных в этом вокселе. Для дальнейшего анализа к полученному распределению может быть применена фильтрация по качеству решения, частоте, энергии и амплитуде источника поля. Метод был успешно верифицирован на компьютерных экспериментах и на физическом фантоме, а затем применен к данным магнитометрии человеческого тела, включая эксперименты по энцефалографии, кардиографии и миографии скелетных мышц [1]. Разрешение метода по частоте определяется временем измерений, для эксперимента длительностью 7 минут оно равно 1/420 Гц, а пространственное разрешение определяется объектом измерений, в статье [1] оно было в диапазоне 1-6 мм. Полученные результаты разумно интерпретируются анатомически, что позволяет говорить о применимости метода в задачах диагностики.

Список литературы:

1. Llinás R.R., Ustinin M., Rykunov S., Walton K.D., Rabello G.M., Garcia J., Boyko A., and Sychev V. Noninvasive muscle activity imaging using magnetography. // Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America. 2020. V. 117. No. 9. P. 4942-4947; <https://doi.org/10.1073/pnas.1913135117>

ЗАДАЧА ПЕРЕНОСА ДЫРКИ В ТРНК НА ОСНОВЕ МОДЕЛИ ПЕРЕНОСА ЗАРЯДА В ДНК

Н.С. Фиалко¹

¹*ИМПБ РАН – филиал ИПМ им. М.В. Келдыша Российской академии наук, fialka@impb.ru*

Ранее на основе гамильтониана Холстейна была предложена модель переноса заряда в ДНК с учетом температуры [1]. Теперь разработанная модель модифицирована для расчетов динамики дырки в ТРНК.

Биофизические эксперименты продемонстрировали, что перенос дырки в В-форме ДНК происходит в основном вдоль одной нити, и квантово-химические расчеты показали, что величины интегралов перехода заряда на комплементарную нить малы. Для тРНК значения интегралов перекрытия сравнительно велики не только между соседними нуклеотидами вдоль одной нити [2]. Поэтому была разработана двунитевая модификация модели (рис.1).

Реализована параллельная версия алгоритма с использованием MPI. Проведено сравнение средних траекторий для однонитевой и двунитевой моделей из начального состояния «дырка появилась на n -ом нуклеотиде» при температуре 300 К, часть параметров взята близкими к ДНК, часть – из статьи [2]. Результаты тестовых расчетов показали, что на больших расчетных временах средние вероятности локализации дырки на нуклеотидах близки для обеих моделей, за исключением антикодона – сайтов G34 A35 A36 (рис. 1).

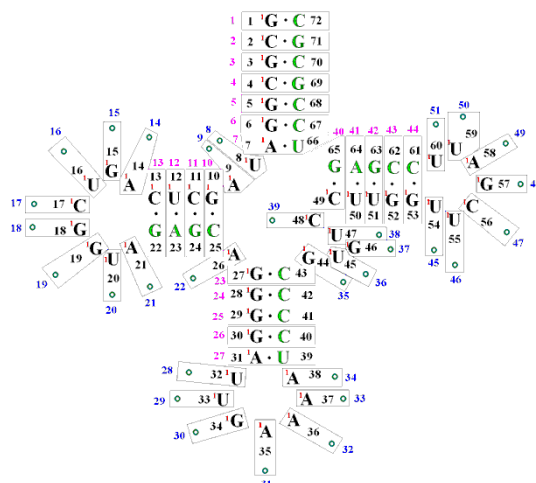


Рис.1. Нумерация сайтов (пар оснований) в двунитевой модели вторичной последовательности тРНК. Пары выделены прямо-угольниками. Неспаренные нуклеотиды дополняются виртуальной парой (синие кружочки). Для однонитевой модели сайты пронумерованы черным цветом.

Вычисления проведены с помощью гибридных суперкомпьютеров К60 и К100, установленных в Суперкомпьютерном Центре коллективного пользования ИПМ им. М.В. Келдыша РАН.

Список литературы:

1. Лахно В.Д., Фиалко Н.С. // Журнал физической химии 2012 т.86 (5), С.928-933

2. Sosorev A., Kharlanov O. // Phys. Chem. Chem. Phys. 2021 V.23, P.7037-7047

О ДИНАМИКЕ ХОЛСТЕЙНОВСКОГО ПОЛЯРОНА ПРИ РАЗНЫХ СПОСОБАХ ЗАДАНИЯ ТЕМПЕРАТУРЫ

Н.С. Фиалко^{1*}, М.М. Ольшевец¹, В.Д. Лахно¹

¹ИМПБ РАН - филиал ИПМ им. М.В. Келдыша Российской академии наук, *fialka@impb.ru

Вопрос о механизмах распространения заряда в квазиодномерных макромолекулах, например в ДНК, представляет интерес для биофизики и нанобиоэлектроники [1]. Благодаря своей стабильности, поляронный механизм переноса заряда привлекает внимание большого числа исследователей.

В модели Холстейна с термостатом Ланжевена на классическую цепочку сайтов действуют случайные толчки окружающей среды. Ранее было показано, что в этом случае разрушение полярона зависит не от температуры, а от тепловой энергии цепочки [2]. Сейчас мы рассмотрели другой способ задания температуры T . Исследовано поведение полярона, в начальный момент «возникающего» в цепочке, разогретой до заданной T . Численно интегрировалась по времени t гамильтонова система уравнений, в которой есть сохраняющаяся величина – полная энергия, состоящая из энергии полярона и энергии цепочки E_0 (кинетическая $E_{\text{kin}}(0)$ + потенциальная). Рассматривались цепочки разной длины с параметрами, соответствующими однородным фрагментам ДНК. Траектории интегрировались на больших временах, затем рассчитывались средние по интервалу величины, в том числе

$$\bar{E}_{\text{kin}} = \frac{1}{\Delta t} \int_{\Delta t} E_{\text{kin}} dt.$$

Показано, что в системе происходит перераспределение энергии: $\bar{E}_{\text{kin}} < E_{\text{kin}}(0)$; можно сказать, что внесение полярона «охлаждает» цепочку.

Зависимость области существования полярона от величины $\bar{E}_{\text{kin}}$ близка к зависимости, определенной ранее с ланжевенским термостатом [2], что не противоречит гипотезе эргодичности.

В области делокализованного состояния заряда результаты $\bar{E}_{\text{kin}} = \bar{E}_{\text{kin}}(E_0)$ лежат на прямой, параллельной $\bar{E}_{\text{kin}} = E_0/2$ со сдвигом на 2η (η – интеграл перекрытия между сайтами). Т.е. в этой области привнесение полярона в цепочку из N сайтов приводит к

«охлаждению» на $T \approx 2\eta/N$. Для биологически значимых температур около 300 К этот вклад несущественен, но в области малых температур такое уточнение может быть важным.

Вычисления проведены с использованием оборудования ЦКП ИПМ им. М.В.Келдыша РАН (<http://ckp.kiam.ru>)

Список литературы:

1. A. Offenhausser, R. Rinaldi (eds.) Nanobioelectronics - for Electronics, Biology, and Medicine // Springer-Verlag, New York 2009.
2. Лахно В.Д., Фиалко Н.С. // ЖЭТФ 2015 Т.147 (1) С.142–148.

О МОДЕЛИРОВАНИИ ЦИЛИНДРИЧЕСКОЙ МЕДЛЕННОЙ НЕОБЫКНОВЕННОЙ ВОЛНЫ

А.А. Фролов¹, Е.В. Чижонков²

¹*Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, frolova@lebedev.ru*

²*Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, chizhonk@mech.math.msu.su*

Исследовано влияние внешнего магнитного поля на нерелятивистские цилиндрические плазменные колебания. Для инициализации медленной необыкновенной волны в магнитоактивной плазме предложен способ построения недостающих начальных условий на основе решения линейной задачи в виде рядов Фурье-Бесселя. С целью численного моделирования нелинейной волны построена схема метода конечных разностей второго порядка точности типа Мак-Кормака. Показано, что при учете внешнего магнитного поля ленгмюровские колебания трансформируются в медленную необыкновенную волну. При этом скорость волны увеличивается с ростом внешнего постоянного поля, что способствует выносу энергии из первоначальной области локализации колебаний. По этой причине известный эффект внеосевого опрокидывания наблюдается с запаздыванием по времени, а начиная с некоторого критического значения внешнего поля, перестает реализовываться совсем, т.е. формируется глобальное по времени гладкое решение.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Минобрнауки РФ в рамках реализации программы Московского центра фундаментальной и прикладной математики по соглашению № 075-15-2019-1621

Список литературы:

1. Фролов А.А., Чижонков Е.В. // Вычисл. методы и программирование. 2020. Т.21. С.420-439.
2. Frolov A.A., Chizhonkov E.V. // Mathematical Models and Computer Simulations. 2022, V.14, No.1, P. 1–9.
3. Frolov A.A., Chizhonkov E.V. // Computational Mathematics and Mathematical Physics. 2022, V.62, No.5. P. 845-860.

**ЛОКАЛИЗОВАННЫЕ ВОЛНЫ В ЦЕПОЧКАХ СВЯЗАННЫХ
ЧАСТИЦ С ПОПЕРЕЧНЫМИ СМЕЩЕНИЯМИ:
ВОЗБУЖДЕНИЕ, ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ,
МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ**

А.П.Четвериков^{1,2}, Е.И.Гераськин¹, В.Д.Лахно²

¹*Саратовский государственный университет им.Н.Г.Чернышевского,
chetverikovap@info.sgu.ru*

²*ИМПБ – филиал ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, lak@impb*

Особенностью таких молекул как ДНК является поперечное движение частиц цепочки относительно оси молекулы. Динамические режимы, в которых учитывается только изменение смещения частиц (нуклеотидов) от положения равновесия часто исследуются в рамках консервативной механической модели Пейрарда-Бишопа–Доксуа (ПБД) [1], которая представляет собой модель цепочки точечных масс M , связанных между собой нелинейными силами (модель нелинейных осцилляторов). При достаточно сильной связи между осцилляторами в цепочке могут формироваться, благодаря нелинейности осцилляторов и дисперсии дискретной цепочки, нелинейные локализованные возмущения, мобильные и немобильные. Они могут возбуждаться как управляемым воздействием на один или несколько осцилляторов [2], так и возникать спонтанно благодаря стохастическому (термическому) воздействию на молекулу при достаточно высокой температуре [1]. В последнем случае возникает много нелинейных локализованных возмущений, распространяющихся в обоих направлениях вдоль цепочки и время от времени попарно взаимодействующих друг с другом. В настоящей работе методами численного эксперимента исследуются различные сценарии взаимодействия встречных локализованных волн, рассматриваемые как элементарные события, происходящие в ДНК при высокой температуре.

Гамильтониан модели записывается в виде

$$H_{lat} = \sum_n \left\{ \frac{p_n^2}{2M} + D \left[e^{-2bx_n} - 2e^{-bx_n} \right] + \frac{k}{2} (x_n - x_{n-1})^2 \left[1 + \rho e^{-\alpha(x_n + x_{n-1})} \right] \right\},$$

где p_n , x_n – импульс и координата n -ной частицы, D и b – параметры потенциала Морзе нелинейного осциллятора, k , ρ , α – параметры междоузельного потенциала.

Работа поддержана грантом РФФИ № 19-07-00406.

Список литературы:

1. Dauxois T., Peyrard M., Bishop A. R. // Phys. Rev. E. Vol. 47. 2755, 1993.
2. Chetverikov A. P., Ebeling W., Lakhno V. D., Shigaev A. S., Velarde M. G. // Eur. Phys. J. B. Vol. 89, 101, 2016.

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ДВУМЕРНЫХ ДВУХФАЗНЫХ СХЕМ ДЛЯ РЕШЕНИЯ СИСТЕМЫ УРАВНЕНИЙ БАЕРА-НУНЦИАТО НА ПРИМЕРЕ ЗАДАЧИ РИМАНА

П.А.Чупров¹

¹Институт автоматизации проектирования РАН, petchu@mail.ru

В работе представлены результаты численного моделирования верификационной задачи [1] для двухфазной двумерной системы уравнений Байера-Нунциато, используемой для разнообразных многофазных задач, например задач внутренней баллистики. Моделирование производилось с помощью метода HLL [2] и HLLC-подобного метода собственной разработки, описанного, например в [3]. Постановка задачи – двумерный распад разрыва:

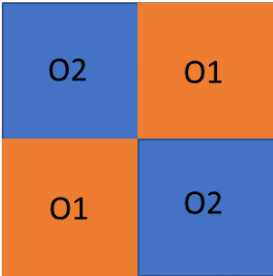
O2	O1	
$\bar{\alpha} = 0.4$	$\bar{\alpha} = 0.3$	
$\bar{p} = 800$	$\bar{p} = 1000$	
$\bar{p} = 500$	$\bar{p} = 600$	
$\bar{u} = 0$	$\bar{u} = 0$	
$\bar{v} = 0$	$\bar{v} = 0$	
$\rho = 1.5$	$\rho = 1$	
$p = 2$	$p = 1$	
$u = 0$	$u = 0$	
$v = 0$	$v = 0$	
		

Рисунок 1. Постановка задачи

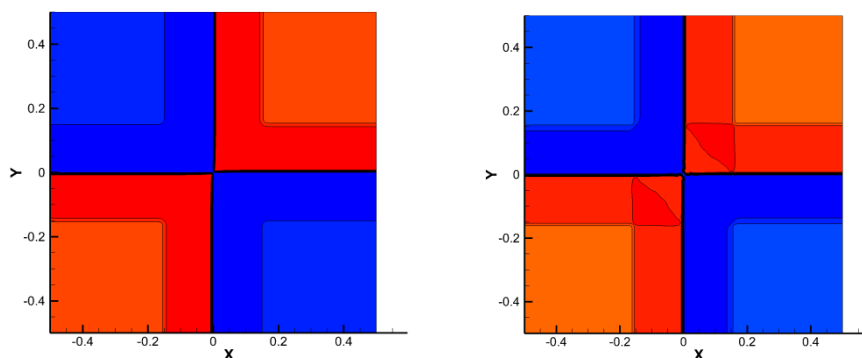


Рисунок 2. результаты моделирования в момент времени $t = 0.1$ для HLL и HLLC соответственно

Результаты показывают превосходство HLLC-подобного метода в отображении тонких структур течения, что служит доказательством корректности построения метода.

Список литературы:

1. Dumbser M., Boshner W. // Computers & Fluids. 2013. 405-432.
2. Saurel R., Abgrall R. // Journal of Computational Physics. 1999. 150
3. Чупров П.А., Порошина Я.Э., Уткин П.С. // Горение и взрыв. 2022. 71-78.

АЛГОРИТМ ВЫЧИСЛЕНИЯ ЭФФЕКТИВНОЙ ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТИ ГЕТЕРОГЕННОЙ СРЕДЫ НА ОСНОВЕ РЕЗУЛЬТАТОВ ПРЯМОГО КОНЕЧНОЭЛЕМЕНТНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Э.П. Шурина^{1,2}, Д.В. Добролюбова^{1,2}, А.Ю. Кутищева^{1,2},
Е.И. Штанько²

¹*Новосибирский государственный технический университет,
Новосибирск,*

²*Институт нефтегазовой геологии и геофизики им. А.А. Трофимука
СО РАН, Новосибирск, mik_kat@ngs.ru*

Одной из востребованных прикладных задач в области геофизики является получение эффективной электропроводности по набору послойных цифровых изображений (сканов). В данной работе разработан и реализован алгоритм вычисления эффективного коэффициента электропроводности на основе закона Ома. Основной

частью алгоритма является решение прямой задачи о распределении скалярного потенциала в области при заданной разности потенциалов на верхнем и нижнем основаниях образца. Решение прямой задачи выполняется гетерогенным многомасштабным методом конечных элементов, что обусловлено существенной геометрической сложностью исследуемой среды.

Внутренняя структура гетерогенной среды представлена в виде стека сканов. Такая форма представления входных данных характерна при исследовании кернов различными методами неразрушающей визуализации (компьютерная томография, рентгеновская микроскопия и т.д.). Описание образца набором цифровых изображений позволяет с высокой точностью отобразить его внутреннюю структуру, однако для численного моделирования сеточными методами требуется наличие трехмерной дискретной модели. В работе предлагается алгоритм построения согласованного симплициального сеточного разбиения с учетом данных о межфрагментарных границах в гетерогенной среде, полученных с ее послойных изображений [1].

Алгоритм построения внутреннего разбиения образца по стеку послойных изображений реализован в рамках проекта FWZZ-2022-0030. Определение эффективной электропроводности среды – при поддержке проекта FWZZ-2022-0025.

Список литературы:

1. Шурина, Э.П., Добролюбова, Д.В., Штанько, Е.И. Специальные процедуры для работы с объектами со сложной внутренней структурой по стеку КТ-сканов [Электронный ресурс] // Cloud of Science. - 2018. - 5. - № 1. - С. 40-58

АЛФАВИТНЫЙ УКАЗАТЕЛЬ

А

Абалакин И.В.	16
Авакян Л.А.	37
Аксенов В.В.	17
Алексеев А.К.	19, 20
Анпилов С.В.	70, 102
Аронов П.С.	22
Архипов Д.А.	23

Б

Байков Н.Д.	24
Балабаев Н.К.	25
Безродных С.И.	26, 27
Беклемешева К.А.	17
Белых В.Н.	29
Беклемышева К.А.	17
Бибердорф Э.А.	30
Бобков В.Г.	16
Бойко А.И.	31, 101, 108
Бондарев А.Е.	19, 20
Борисов В.Е.	32
Бочев М.А.	33
Бритов А.Д.	94
Брушлинский К.В.	35
Булина Н.В.	37
Бухаров Д.Н.	36
Быстров В.С.	37

В

Васюков А.В.	17
Варин В.П.	39
Веденяпин В.В.	40
Вергелес С.С.	83
Власов В.И.	27
Волков Б.В.	82

Г

Галанин М.П.	22, 41
Галкин В.А.	43
Галстьян Е.А.	92
Гераськин Е.И.	113
Голубев В.И.	81
Григоренко В.Г.	89
Грохлина Т.И.	91
Гусев А.О.	44

Д

Денисенко В.В.	45
Добролюбова Д.В.	115
Дубовик А.О.	43
Дудникова Т.В.	46

Е

Егоров А.М.	89
Егоренков В.А.	106
Елистратов А.В.	60
Епихин А.С.	94, 103
Ефимов А.В.	100

Ж

Жуков В.Т.	47
------------	----

З

Зайцев Н.А.	48
Зеленчук П.А.	49
Злотник А.А.	50, 51, 52

И

Иванов В.В.	91
Иванова Н.В.	54
Имайкин В.М.	55
Иткина Н.Б.	78, 107

К

Кайшева А.Л.	100
Капцов Е.И.	56
Клюшнев Н.В.	57
Книжнерман Л.А.	33
Козубская Т.Г.	16
Колесников И.Ю.	58
Коломбет В.А.	60
Константиновская Т.В.	32
Коптев А.В.	62
Коршунова А.Н.	64
Краснов М.М.	67
Крюченков В.В.	35
Кудрявцева Л.К.	16
Кудряшова Т.А.	92
Куликова Л.И.	100
Кутищева А.Ю.	69, 115

Л

Ламзин В.С.	89
-------------	----

Лапонин В.С.	70, 102	Розанова О.С.	99
Лахно В.Д.	64, 71, 111, 113	Рубцова М.Ю.	89
Лебедев А.В.	54	Руднев В.Р.	100
Лесных В.Н.	60	Рыков Ю.Г.	57
Ливенец З.Д.	72	Рыкунов С.Д.	31, 101, 108
Лихачев И.В.	37, 74		
Логинова М.М.	106	С	
Ломоносов Т.А.	51	Савенкова Н.П.	70, 102
Луговский А.Ю.	72	Самыгина В.Р.	89
Лунин В.Ю.	75, 76	Сибгатуллин И.Н.	103
Лунина Н.Л.	76	Силакова Ю.Г.	97
Луцкий А.Е.	32	Складчиков С.А..	70, 102
М		Скубачевский А.А.	81
Мажорова О.С.	44	Степин Е.В.	35
Максимов Ф.А.	77	Сухов А.Д.	103
Марков С.И.	78		
Махортых С.А.	80	Т	
Москаленко А.В.	80	Тарасов Н.И.	90, 92
		Таюрский А.А.	105
Н		Тимош П.С.	98
Никитин А.Д.	82	Трофимов В.А.	106
Никитин И.С.	81, 82	Трофимова С.А.	107
Никольский К.С.	100		
Новикова Н.Д.	47	У	
		Упоров И.В.	89
О		Усачев В.А.	90
Огородников Л.Л.	83	Устинин М.Н.	31, 101, 108
Ольшевец М.М.	111		
П		Ф	
Панкратов А.Н.	85	Федченко А.С.	52
Панкратова Н.М.	85	Феодоритова О.Б.	47, 67
Панченко Л.А.	91	Фиалко Н.С.	109, 111
Парамонова Е.В.	37	Фортова С.В.	45
Переварюха А.Ю.	86	Фролов А.А.	112
Петров А.Г.	24, 40, 88, 94, 103		
Петров И.Б.	17	Ц	
Петрова Т.Е.	89	Цветкова В.О.	16
Петровский Д.В.	100	Цибулин В.Г.	49
Подрыга В.О.	90		
Полозов Р.В.	91	Ч	
Поляков С.В.	90, 92	Четвериков А.П.	113
Потапов Д.И.	95	Чижонков Е.В.	112
Потапов И.И.	94, 95, 96, 97, 98	Чупров П.А.	114
Пятакава Ю.С.	20		
Р		Ш	
Решетникова О.В.	96	Шанин В.Н.	54
Родин А.С.	22, 41	Шашков М.П.	54
		Штанько Е.И.	115
		Шурина Э.П.	23, 69, 78, 107, 115

Щ

Щерица О.В. 44

Latin

Botchev M.A. 33

Carolan C. 89

Chojnowski G. 89

Knizhnerman L.A. 33

Pereira J. 89

Schweitzer M. 33

Trofimov V.A. 106

Scientific publication

Editorial and computer preparation for publication
– A.L. Afendikov, V.T. Zhukov, T.V. Konstantinovskaya, A.A. Tayursky,
T.V. Dudnikova

Printed from the original layout made at the
Keldysh Institute of Applied Mathematics RAS