



Южный федеральный университет
(ЮФУ, г. Ростов-на-Дону)
Институт математики, механики и компьютерных наук
им. И.И. Воровича
(ИММиКН, г. Ростов-на-Дону)
Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН
(ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, г. Москва)

**СОВРЕМЕННЫЕ ПРОБЛЕМЫ
МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ**

Сборник трудов

**XIX ВСЕРОССИЙСКОЙ КОНФЕРЕНЦИИ-ШКОЛЫ
МОЛОДЫХ ИССЛЕДОВАТЕЛЕЙ**

пос. Абрау-Дюрсо, 13–18 сентября 2021 г.

Ростов-на-Дону – Таганрог
Издательство Южного федерального университета
2021

УДК 519.87:001.891.573(063)
ББК 22.18 я431
С56

Ответственные редакторы: Г.В. Муратова
И.Н. Шабас

С56 Современные проблемы математического моделирования :
сборник трудов XIX Всероссийской конференции-школы молодых
исследователей (пос. Абрау-Дюрсо, 13–18 сентября 2021 г.) / отв.
ред. Г.В. Муратова, И.Н. Шабас ; Южный федеральный
университет. – Ростов-на-Дону ; Таганрог : Издательство Южного
федерального университета, 2021. – 72 с.
ISBN 978-5-9275-3998-7

В сборнике представлены доклады участников XIX Всероссийской конференции-школы молодых исследователей «СОВРЕМЕННЫЕ ПРОБЛЕМЫ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ», посвященной памяти Л.А. Крукиера, организованной Институтом прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН и Институтом математики, механики и компьютерных наук им. И.И. Воровича Южного федерального университета, проходившей с 13 по 18 сентября 2021 года в поселке Абрау-Дюрсо, Новороссийск, Россия. В работе Школы приняли участие представители научных центров Новосибирска, Москвы, Санкт-Петербурга, Екатеринбурга, Краснодара, Черноголовки, Уфы и Ростова-на-Дону.

***Сборник издан при поддержке
гранта Правительства РФ № 075-15-2019-1928***

УДК 519.87:001.891.573(063)
ББК 22.18 я431
ISBN 978-5-9275-3998-7

© ИММиКН им.И.И.Воровича ЮФУ, 2021
© Южный федеральный университет, 2021

Оглавление

СХЕМА КАБАРЕ В ЛАГРАНЖЕВЫХ ПЕРЕМЕННЫХ Афанасьев Н.А., Головизнин В.М.	4
РАЗНОСТНЫЕ НЕОТРАЖАЮЩИЕ ГРАНИЧНЫЕ УСЛОВИЯ ДЛЯ ГАЗОДИНАМИЧЕСКИХ СХЕМ С ШИРОКИМИ ШАБЛОНАМИ Дородницын Л.В.	5
АЛГОРИТМ ПРИБЛИЖЕНИЯ СТРУКТУРЫ ПЛОСКОЙ ВИХРЕ- ВОЙ КОНФИГУРАЦИИ Лысенко Ф.П., Говорухин В.Н.	11
ОБ ОСОБЕННОСТЯХ МОДЕЛИРОВАНИЯ ФАЗОВОГО РАВНОВЕ- СИЯ ГЕЛИЙ СОДЕРЖАЩИХ СИСТЕМ Малышев В.Л., Моисеева Е.Ф.	16
ЭФФЕКТИВНЫЕ КОСОЭРМИТОВЫ ПРЕДОБУСЛОВЛИВАТЕЛИ ДЛЯ РЕШЕНИЯ СЕДЛОВЫХ ЗАДАЧ Мартынова Т.С.	20
ЭКСПЕРИМЕНТЫ С БАЗОВОЙ МОДЕЛЬЮ ВЛАСТНОЙ ИЕРАР- ХИИ С НЕКОМПЕТЕНОСТЬЮ И КОРРУПЦИЕЙ: ПЕРВЫЕ РЕ- ЗУЛЬТАТЫ Михайлов А.П.	27
МОДЕЛИРОВАНИЕ МИГРАЦИИ ТЯЖЕЛЫХ МЕТАЛЛОВ В ПОЧВЕ ОТ НАЗЕМНОГО ИСТОЧНИКА Муратова Г.В., Минкина Т.М., Тимофеев А.Н.	38
ПЛАВЛЕНИЕ САПФИРА В УДАРНОЙ ВОЛНЕ Острик А.В., Николаев Д.Н.	44
МОДЕЛЬ ВСПЫШЕК ДЛЯ ПОЛИВОЛЬТИННОГО ЖИЗНЕННОГО ЦИКЛА ВРЕДИТЕЛЯ Переварюха А.Ю.	56
МОДЕЛИРОВАНИЕ ИНТЕНСИВНЫХ ПУЧКОВ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ В ПРОТЯЖЕННЫХ СИСТЕМАХ Свешников В.М.	61
МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ЗАТОПЛЕНИЯ/ОСУШЕНИЯ ДЕЛЬТОВОЙ ОБЛАСТИ ДОНА Чикин А.Л.	65

СХЕМА КАБАРЕ В ЛАГРАНЖЕВЫХ ПЕРЕМЕННЫХ¹

Афанасьев Н.А., Головизнин В.М.

МГУ им. М.В. Ломоносова, Факультет Вычислительной Математики и Кибернетики, Москва

Схема КАБАРЕ [1], являющаяся представителем семейства балансно-характеристических методов, широко используется при решении многих задач для систем дифференциальных уравнений гиперболического типа в эйлеровых переменных. Возрастающая актуальность задач вычислительной океанологии и взаимодействия упругопластичных тел с потоками жидкости и газа требует адаптации этого метода на лагранжевы и смешанные эйлероволагранжевые переменные. Ранее схема КАБАРЕ была построена для одномерных уравнений газовой динамики в массовых лагранжевых переменных, а также для трехмерных уравнений динамической упругости [2]. В первом случае построенную схему не удалось обобщить на многомерные задачи, во втором — использовался необратимый по времени алгоритм передвижения сетки.

В данной работе представлен новый баланснохарактеристический метод решения одномерных и двумерных уравнений газовой динамики и динамической упругости в лагранжевых переменных. Построенный метод обладает свойством временной обратимости, причем использование в методе характеристик и локальных инвариантов Римана позволяет относительно легко «сшивать» газодинамические и упругие ячейки для решения задач взаимодействия упругих тел с потоками газа. Метод тестируется на различных одномерных и двумерных задачах для обеих систем уравнений (распространение акустических колебаний, тепловые удары газа об упругое тело, соударение упругих тел и др.).

Литература

1. *Karabasov S. A., Goloviznin V. M.* Compact accurately boundary-adjusting high-resolution technique for fluid dynamics // *Journal of Computational Physics*. 2009. Vol. 228, N. 19. P. 7426–7451.
2. *Зайцев М.А., Карабасов С.А.* Схема Кабаре для численного решения задач деформирования упругопластических тел // *Матем. моделирование*. 2017, Т. 29, N. 11, С. 53-70.

¹Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 20-31-90037).

РАЗНОСТНЫЕ НЕОТРАЖАЮЩИЕ ГРАНИЧНЫЕ УСЛОВИЯ ДЛЯ ГАЗОДИНАМИЧЕСКИХ СХЕМ С ШИРОКИМИ ШАБЛОНАМИ¹

Дородницын Л.В.

Московский государственный университет
имени М.В. Ломоносова, Москва

В численном моделировании многомерных задач аэроакустики и детального описания турбулентных течений (LES) применяются разностные алгоритмы высокой точности, которая достигается, как правило, благодаря использованию широких шаблонов. В числе таких методов — схемы рёберной реконструкции (EBR) на произвольных неструктурированных сетках [1] и схемы, сохраняющие дисперсионные соотношения, (DRP) на равномерных прямоугольных сетках [2]. Настоящее исследование посвящено построению условий вблизи искусственных границ расчетной области.

Проблема неотражающих искусственных граничных условий не теряет актуальности. Например, в алгоритмах генерации синтетического турбулентного поля на входной границе или при моделировании выхода струи локальные граничные уравнения нередко приводят к сильному отражению акустических волн. Нелокальные условия и поглощающие слои (PML, [3]), требующие больших вычислительных затрат, плохо адаптируются к данному классу задач.

Постановки разностных начально-краевые задачи значительно отличаются от дифференциальных, однако эти вопросы недостаточно исследованы в имеющейся литературе. В частности, схемы с широкими шаблонами нуждаются в большом количестве граничных уравнений. Детальный анализ был проведен автором в [4] для одномерного случая DRP-схемы. Настоящая работа продолжает исследования [5].

Типичный пример дифференциальной задачи являет двумерное волновое уравнение. Одномерное неотражающее условие на правой границе приводит к отражению косых волн, падающих под углом θ , с коэффициентом отражения $R(\theta)$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 p}{\partial t^2} - \left(\frac{\partial^2 p}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 p}{\partial y^2} \right) &= 0, \quad 0 < x < X, \quad 0 < y < Y, \quad t > 0, \\ (\partial p / \partial t + \partial p / \partial x)|_{x=X} &= 0, \\ p(x, y, t; \omega, \theta) &= \exp\{i\omega t - i\omega x \cos \theta - i\omega y \sin \theta\} + \\ &+ R \exp\{i\omega t + i\omega x \cos \theta - i\omega y \sin \theta\}, \quad R = R(\theta) = -\operatorname{tg}^2(\theta/2). \end{aligned} \quad (1)$$

Особенности многомерных схем с широкими шаблонами видны на уровне линеаризованных уравнений на равномерных прямоугольных сетках. С помощью преобразования Фурье–Лапласа исследуется структура решений и

¹Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 20-31-90037).

предлагаются новые варианты разностных граничных условий, которые понижают ложное отражение волн.

I Дифференциальные линейризованные уравнения Эйлера

Двумерные линейризованные дифференциальные уравнения Эйлера с постоянными коэффициентами имеют вид

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \mathbf{C}_x \frac{\partial U}{\partial x} + \mathbf{C}_y \frac{\partial U}{\partial y} = 0, \quad U = (\rho' u' v' p')^T, \quad (2)$$

$$\mathbf{C}_x = \begin{pmatrix} u & \rho & 0 & 0 \\ 0 & u & 0 & 1/\rho \\ 0 & 0 & u & 0 \\ 0 & \rho c^2 & 0 & u \end{pmatrix}, \quad \mathbf{C}_y = \begin{pmatrix} v & 0 & \rho & 0 \\ 0 & v & 0 & 0 \\ 0 & 0 & v & 1/\rho \\ 0 & 0 & \rho c^2 & v \end{pmatrix}.$$

Общее решение (2) разлагается по гармоникам четырех видов — правой акустической (с волновым числом k_1), левой акустической (k_2), энтропийной (k_3) и вихревой (k_4) волнам:

$$U(x, y, t; \omega, \ell) = \sum_{j=1}^4 a_j \widehat{U}_j \exp\{i\omega t - ik_j x - i\ell y\},$$

$$(\widehat{U}_1(\theta) \quad \widehat{U}_2(\theta) \quad \widehat{U}_3(\theta) \quad \widehat{U}_4(\theta)) = \begin{pmatrix} \rho & \rho & \rho & 0 \\ c \cos \theta_1 & c \cos \theta_2 & 0 & -c \operatorname{tg} \theta_3 \\ c \sin \theta_1 & c \sin \theta_2 & 0 & c \\ \rho c^2 & \rho c^2 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (3)$$

где $\theta \equiv \theta_1$, $\operatorname{tg} \theta_j = \ell/k_j$. Полное изложение см., напр., в [3].

Отдельный интерес представляет одномерный случай ($\theta_1 = \theta_2 = \theta_3 = 0$), дающий собственные векторы $\widehat{U}_j(0)$, разложение матрицы \mathbf{C}_x и волновые числа, выписанные ниже:

$$\mathbf{U} = \mathbf{U}(0) = (\widehat{U}_1(0) \quad \widehat{U}_2(0) \quad \widehat{U}_3(0) \quad \widehat{U}_4(0)), \quad (4)$$

$$\mathbf{C}_x = \mathbf{U} \Lambda_x \mathbf{U}^{-1}, \quad \Lambda_x = \operatorname{diag}(u+c, u-c, u, u),$$

$$k_1 = \frac{\omega}{c+u}, \quad k_2 = -\frac{\omega}{c-u}, \quad k_3 = k_4 = \frac{\omega}{u}. \quad (5)$$

При дозвуковом течении ($0 < u < c$) левая акустическая волна (k_2) распространяется влево, остальные — вправо. Это верно как в одномерном (5), так и в двумерном случаях.

II Схемы для двумерных уравнений Эйлера

При аппроксимации двумерных линеаризованных уравнений Эйлера 2 схемы с направленными разностями имеют общий вид

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \mathbf{C}_x^+ \mathcal{D}_x^+ U + \mathbf{C}_x^- \mathcal{D}_x^- U + \mathbf{C}_y^+ \mathcal{D}_y^+ U + \mathbf{C}_y^- \mathcal{D}_y^- U = 0. \quad (6)$$

Здесь \mathcal{D}_x^+ and \mathcal{D}_x^- — два «зеркальных» оператора направленных разностей, о конкретных примерах которых скажем ниже.

Матрица \mathbf{C}_x разлагается на «положительную» и «отрицательную» части с применением матрицы \mathbf{U} из (4):

$$\begin{aligned} \mathbf{C}_x &= \mathbf{C}_x^+ + \mathbf{C}_x^-, \quad \mathbf{C}_x^+ = \mathbf{U} \Lambda_x^+ \mathbf{U}^{-1}, \quad \Lambda_x^+ = \text{diag} (u+c, 0, u, u), \\ \mathbf{C}_x^- &= \mathbf{U} \Lambda_x^- \mathbf{U}^{-1}, \quad \Lambda_x^- = \text{diag} (0, u-c, 0, 0). \end{aligned}$$

Аналогично $\mathbf{C}_y = \mathbf{C}_y^+ + \mathbf{C}_y^-$.

Разностные операторы представляются в потоковой форме, например:

$$\left(\mathcal{D}_x^+ u \right)_j = \frac{f_{j+1/2}^+ - f_{j-1/2}^+}{\Delta x}, \quad f_{j+1/2}^+ = \sum_l b_l u_{j+l}.$$

Схемы (6) с центральными разностями, обладая свойством $\mathcal{D}_x^+ = \mathcal{D}_x^- = \mathcal{D}_x^h$, приобретают более простой вид

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \mathbf{C}_x \mathcal{D}_x^h U + \mathbf{C}_y \mathcal{D}_y^h U = 0. \quad (7)$$

Выпишем примеры аппроксимаций производной по x , указывая выражения для потока и разности.

Противопотоковая 4-точечная схема EBR3 из [1]:

$$f_{j+1/2}^+ = \frac{1}{6} (2u_{j+1} + 5u_j - u_{j-1}), \quad \left(\mathcal{D}_x^+ u \right)_j = \frac{2u_{j+1} + 3u_j - 6u_{j-1} + u_{j-2}}{6 \Delta x}.$$

Симметричная 5-точечная схема EBR4 из [1]:

$$\begin{aligned} f_{j+1/2} &= \frac{1}{12} (-u_{j+2} + 7u_{j+1} + 7u_j - u_{j-1}), \\ \left(\mathcal{D}_x^h u \right)_j &= \frac{u_{j-2} - 8u_{j-1} + 8u_{j+1} - u_{j+2}}{12 \Delta x}. \end{aligned}$$

Симметричная 7-точечная схема DRP из [2]:

$$\left(\mathcal{D}_x^h u \right)_j = \frac{1}{\Delta x} \left[\beta_1 (u_{j+1} - u_{j-1}) + \beta_2 (u_{j+2} - u_{j-2}) + \beta_3 (u_{j+3} - u_{j-3}) \right].$$

Решение уравнения (6) разлагается по 4 регулярным модам, которые близки к присущим двумерным уравнениям Эйлера (3), и по большому числу сингулярных мод:

$$U(x, y, t; \omega, \ell) = \exp\{i\omega t - i\ell y\} \left[\sum_{j=1}^4 a_j \widehat{U}_j(\theta) \exp\{-ik_j x\} + \sum_j a_j^S \widehat{U}_j^S \exp\{-ik_j^S x\} \right].$$

Волновые числа сингулярных мод k_m^S приближенно определяются через корни $q = q_m$ характеристического уравнения, дающего нетривиальное решение нулевого потока $f_{j+1/2}$:

$$k_m^S \approx \frac{i}{h} \ln q_m, \quad \sum_l b_l q^l = 0.$$

Для вышеприведенных разностных схем выпишем гармонические решения, используя лишь главные члены разложений: см. (3), (4).

EBR3:

$$U(x_l, y, t; \omega, \ell) = \exp\{i\omega t - i\ell y\} \left[\sum_{j=1}^4 a_j \widehat{U}_j(\theta) \exp\{-ik_j x_l\} + \sum_{j \neq 2} a_j^{S1} \widehat{U}_j(0) q_1^l + a_2^{S1} \widehat{U}_2(0) q_1^{-l} + \sum_{j \neq 2} a_j^{S2} \widehat{U}_j(0) q_2^l + a_2^{S2} \widehat{U}_2(0) q_2^{-l} \right],$$

$$q_1 = \frac{\sqrt{33} - 5}{4}, \quad q_2 = -\frac{\sqrt{33} + 5}{4}.$$

Ложные моды (q_1 и q_2) — быстро затухающие.

EBR4:
$$U(x_l, y, t; \omega, \ell) = \exp\{i\omega t - i\ell y\} \times \sum_{j=1}^4 \widehat{U}_j(\theta) [a_j \exp\{-ik_j x_l\} + a_j^{S1} (-1)^l + a_j^{S2} q_2^l + a_j^{S3} q_3^l],$$

$$q_1 = -1, \quad q_2 = 4 + \sqrt{15}, \quad q_3 = 4 - \sqrt{15}.$$

Корень q_1 отвечает пилообразной волне; корни q_2 и q_3 описывают быстро затухающие экспоненты.

DRP-схема приводит к аналогичному выражению, где присутствуют параметры q_1 , относящийся к пилообразной волне, и q_2, q_3, q_4, q_5 — затухающие волны.

Граничное условие, как в дифференциальном, так и в разностном случае, приводит к системе линейных алгебраических уравнений [6] относительно амплитуд гармоник.

В качестве правого граничного условия для всех перечисленных схем можно предложить условие излучения правой акустической волны

$$\begin{aligned} \frac{d\rho'_{N-j}}{dt} + (c+u) \mathcal{D}_x^{(j)} \rho'_{N-j} = 0, & \quad \frac{du'_{N-j}}{dt} + (c+u) \mathcal{D}_x^{(j)} u'_{N-j} = 0, \\ \frac{dv'_{N-j}}{dt} + (c+u) \mathcal{D}_x^{(j)} v'_{N-j} = 0, & \quad \frac{dp'_{N-j}}{dt} + (c+u) \mathcal{D}_x^{(j)} p'_{N-j} = 0. \end{aligned} \quad (8)$$

Ко всем переменным применяются одинаковые операторы $\mathcal{D}_x^{(j)}$ — направленные разности на широком шаблоне, заданные в узле $N-j$.

При задании условия (8) в решениях схем EBR4 и DRP не образуется отраженная левая акустическая волна ($a_2 = 0$), а амплитуда пилообразной осцилляции по сравнению с амплитудой падающей акустической волны имеет порядок величины шага сетки: $a_2^{S1}/a_1 = O(\Delta x)$. Схема EBR3 дает, в отличие от классической ситуации (1), отражение четвертого порядка: $a_2/a_1 = O(\theta^4)$.

- Для центрально-разностных схем существуют граничные условия, дающие слабое отражение косых волн.
- Для схем с направленными разностями можно построить граничные условия, уменьшающие отражение до 4-го порядка угла падения.
- Теоретические результаты на практике можно обобщить на более сложные модели, включая неравномерные и неструктурированные сетки, а также нелинейность.

Автор выражает благодарность И.В. Абалакину за консультации и обсуждения.

Литература

1. *Abalakin I., Bakhvalov P., Kozubskaya T.* Edge-based reconstruction schemes for unstructured tetrahedral meshes // Int. J. Numer. Meth. Fluids. 2015. Vol. 81. P. 331–356.
2. *Tam C.K.W., Webb J.C.* Dispersion-relation-preserving finite difference schemes for computational acoustics // J. Comput. Phys. 1993. Vol. 107. No.2. P. 262–281.
3. *Hu F.Q.* On absorbing boundary conditions for linearized Euler equations by a perfectly matched layer // J. Comput. Phys. 1996. Vol. 129. P. 201–219.
4. *Dorodnicyn L.W.* Artificial boundary conditions for high-accuracy aeroacoustic algorithms // SIAM J. Sci. Comp. 2010. Vol. 32. No.4. P. 1950–1979.

5. *Дородницын Л.В.* Разностные неотражающие граничные условия для многомерных задач газовой динамики // Современные проблемы математического моделирования. Сборник трудов XVII Всероссийской конференции-школы молодых исследователей. Ростов-на-Дону: Изд-во ЮФУ, 2017. С. 62–69.
6. *Дородницын Л.В.* Искусственные граничные условия при численном моделировании дозвуковых течений газа // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2005. Т.45. N 7. С. 1251–1278.

АЛГОРИТМ ПРИБЛИЖЕНИЯ СТРУКТУРЫ ПЛОСКОЙ ВИХРЕВОЙ КОНФИГУРАЦИИ¹

Лысенко Ф.П., Говорухин В.Н.

Лаборатория 'Вычислительной механики', Институт математики, механики и компьютерных наук имени И.И. Воровича, Южный Федеральный Университет, Ростов-на-Дону

Введение

В задачах гидроаэродинамики возникает необходимость описания структуры вихревого течения по известной информации о скорости жидкости в конечном наборе точек. Такими задачами является описание и анализ экспериментальных данных [1], синоптических потоков, построение моделей течений по данным наблюдений [2], визуализация течений [3] и другие проблемы. На данный момент разработаны схемы решения подобных задач с использованием различных подходов, см. [4, 5].

Возможным способом описания вихревой структуры может быть использование заданных математических моделей, зависящих от параметров, с дальнейшей их идентификацией по известным данным о скорости течения. Такой подход использовался в работе [6], где в качестве модельного поля скорости течения использовался формализм точечных вихрей. В представленной работе в этих целях используется описание структуры с помощью распределенных вихревых пятен заданной формы.

I Формулировка задачи и схема описания вихревой конфигурации

Рассматривается плоское вихревое течение газа или жидкости. Предполагается, что известны векторы скорости в наборе из N точек в фиксированный момент времени:

$$P = \left\{ (x_i, y_i,), v^{(i)} = \left(v_1^{(i)}, v_2^{(i)} \right), i = 1, \dots, N \right\}, \quad (1)$$

где x_i, y_i – координаты точек; а $v_1^{(i)}, v_2^{(i)}$ – соответствующие им компоненты вектора скорости.

Описание структур не ламинарного течения сводится к проблеме поиска и определения характеристик вихревых пятен, которые являются 'каркасом' потока. Необходимо определить координаты центров и интенсивности

¹Работа поддержана грантом Правительства РФ № 075-15-2019-1928.

вихревых пятен, генерирующих рассматриваемое течение, функцию распределения завихренности в них. Для описания вихревой конфигурации естественно использовать модели, зависящие от параметров и решение которых заранее известно или достаточно легко вычисляются. Модельное векторное поле будем обозначать Q и оно имеет вид

$$Q = \left\{ (x_i, y_i), V^{(i)} = \left(V_1^{(i)}, V_2^{(i)} \right), i = 1, \dots, N \right\}, \quad (2)$$

где x_i, y_i – координаты точек, заданных набором P ; а $V_1^{(i)}, V_2^{(i)}$ – компоненты вектора скорости модельного поля в этих точках.

Критерием того, что полученная вихревая конфигурация найдена верно, будет являться близость исходного поля скорости и поля, порождаемого модельной конфигурацией.

Для сравнения двух векторов $W = (W_1, W_2)$ и $U = (U_1, U_2)$ будем использовать следующие функции:

$$d(W, U) = \frac{\sqrt{(W_1 - U_1)^2 + (W_2 - U_2)^2}}{\|W\| \|U\|}, \quad \phi(W, U) = 1 - \frac{W_1 U_1 + W_2 U_2}{\|W\| \|U\|}, \quad (3)$$

которые, в случае совпадения векторов W и U , будут равны нулю.

Для сравнения двух векторных полей P и Q ситуация сильно осложняется, но мы будем использовать выражение:

$$\sigma(P, Q) = \sum_{i=1}^N c_i d(v^{(i)}, V^{(i)}) + \sum_{i=1}^N C_i \phi(v^{(i)}, V^{(i)}), \quad (4)$$

где c_i и C_i – весовые коэффициенты, которые в этой работе принимаются одинаковыми. Описание характеристик вихревой конфигурации, будет состоять в определении параметров модельной конфигурации, порождающей поле Q и минимизирующей $\sigma(P, Q)$ по параметрам используемой вихревой модели.

В представленной работе будем использовать модель, определяемую уравнением связи завихренности и функции тока, которая имеет вид

$$\frac{\partial^2 \psi(x, y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi(x, y)}{\partial y^2} = -\omega(x, y) \quad (5)$$

Задавая распределение $\omega(x, y)$ и решая уравнение (5) относительно $\psi(x, y)$, модельное векторное поле принимает вид

$$Q = \left\{ (x_i, y_i), V^{(i)} = \left(V_1^{(i)} = -\frac{\partial \psi}{\partial y}, V_2^{(i)} = \frac{\partial \psi}{\partial x} \right), i = 1, \dots, N \right\}, \quad (6)$$

В рассматриваемом здесь описании вихревой конфигурации распределение $\omega(x, y)$ в правой части (5) является комбинацией вихревых пятен вида

$$\omega(x, y) = \sum_{i=1}^k p_1^{(i)} e^{-p_2^{(i)} \left((x-x_c^{(i)})^2 + (y-y_c^{(i)})^2 \right)}, \quad (7)$$

где k – количество вихревых пятен, $(x_c^{(i)}, y_c^{(i)})$ – координаты вихря с номером i , а $p_1^{(i)}, p_2^{(i)}$ – параметры, определяющие интенсивность вихревого пятна, и распределение завихренности в нём. Все эти величины подлежат определению с помощью минимизации (4).

II Вычисление характеристик вихревой конфигурации

В данной работе для минимизации (4) используется метод градиентного спуска. Далее приведем шаги предлагаемого алгоритма.

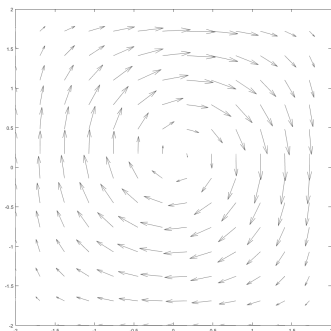
1. Поиск максимального по длине вектора v_{max} исходного набора P . Нормировка векторов скорости $v^i = \frac{v^i}{\|v_{max}\|}$.
2. Задание начального ($j = 0$) приближения конфигурации распределенных вихрей $G^0 = (p_{1k}^0, p_{2k}^0, x_k^0, y_k^0), k = 1, \dots, K$. Определение параметров метода: начального шага метода градиентного спуска h , шага для аппроксимации вектора градиента центральными разностями δ , точности минимизации ϵ .
3. Разложение (7) в ряд Фурье и решение уравнения (5) методом Галеркина. Вычисление в точках с координатами $(x_i, y_i), i = 1, \dots, k$, заданных набором P , векторов набора Q^0 с помощью выражений для компонент скорости (6) при параметрах вихревой конфигурации G^0 .
4. Нормировка поля $Q^j = \frac{Q^j}{\|v_{max}\|}$. Расчет вектора градиента $F^j = \nabla \sigma(P, Q^j)$ размерностью $4K$. По каждой из характеристик Q^j вводятся возмущения $\pm \delta$, строятся поля вида (6) с учетом возмущений, рассчитывается соответствующее значение (4), вычисляется аппроксимация компоненты вектора F^j центральными конечными разностями.
5. Проверка условия $\|F^j\| < \epsilon$. Если условие выполнено, то найдено приближение вихревой конфигурации Q^j, G^j и работа алгоритма прекращается. Если нет, то переход к следующему пункту алгоритма.
6. Вычисление $G^* = G^j - hF^j$ и векторов $(\sigma(P, Q^*))$.
7. Проверка условия $\sigma(P, Q^*) \leq \sigma(P, Q^j)$. Если условие выполнено, то $h = 1,05h; Q^j = Q^*$. В противном случае $h = h/2, j = j + 1$. Переход ко второму пункту алгоритма.

III Численные эксперименты

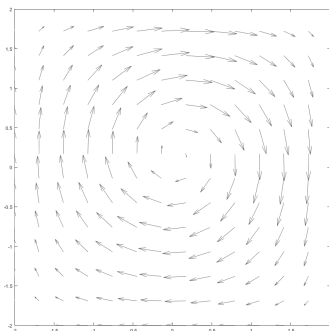
Оценим эффективность алгоритма на примере одного вихревого пятна. Вектора скоростей определим в точках, задаваемых сеткой, и в случай-

ных точках области течения. Параметры метода использовались следующие: $c_1 = C_1 = 0.5$ – весовые коэффициенты, $h = 0.001$ – начальный шаг метода градиентного спуска, $\delta = 0.005$ – шаг аппроксимации для вычисления вектора градиента, $\epsilon = 10^{-5}$ – "точность минимизации".

Возьмем поле, порождаемое конфигурацией (7) такое, что: $x_c = 0.1, y_c = 0.2, p_1 = 1, p_2 = 1$. Восстановим исходные параметры с помощью алгоритма. В качестве начального приближения возьмем: $x_{c0} = 0.2, y_{c0} = 0.3, p_{10} = 2, p_{20} = 1.4$. Как видно из Рисунка 1 параметры найдены верно. Зависимости



Исходная конфигурация



Полученная конфигурация

Рис. 1. Поля скорости вихревой конфигурации

числа итераций алгоритма (j), от количества известных векторов скорости (N) приведены в Таблицах 1 и 2. Стоит отметить, что для данной задачи точность начального приближения влияет только на скорость, но не на сам факт сходимости.

Таблица 1. Количество известных векторов (N) и число итераций, потребовавшихся для сходимости. Распределенный вихрь, поле задано сеткой.

N	4	9	16	25	36	49	100	400
j	1383	357	667	355	959	871	360	489

Таблица 2. Количество известных векторов (N) и число итераций, потребовавшихся для сходимости. Распределенный вихрь, поле задано в случайных точках.

N	5	8	12	19	27	38	85	340
j	1189	402	608	412	579	851	430	452

IV Заключение

В данной работе была описана разработка и реализация алгоритма идентификации вихревых пятен. Для идентификации использовалась модель распределенного вихря. Численные эксперименты указывают на эффективность метода в случае одного вихревого пятна для экспоненциального представления интенсивности. Дальнейшее развитие алгоритма предполагает рассмотрение случаев с несколькими вихревыми пятнами, использование иных вихревых моделей, проведение расчетов с опытными данными, а также улучшение скорости сходимости за счет включения других методов минимизации.

Литература

1. *Berson A., Michard M., Blanc-Benon Ph.* Vortex identification and tracking in unsteady flows // *Comptes Rendus - Mecanique*, 2009, V.337 (2), pp. 61-67.
2. *Schielicke L., Gatzert C.P., Ludwig P.* Vortex identification across different scales // *Atmosphere*, 2019, V.10 (9), статья № 518
3. *Волков К.Н., Емельянов В.Н., Тетерина И.В., Яковчук М.С.* Методы и концепции визуализации вихревых течений в задачах вычислительной газовой динамики // *Вычис. методы и программирование*. 2016. Т. 17, вып. 1. С. 81–100.
4. *Chakraborty P., Balachandar S., Adrian R.J.* On the relationships between local vortex identification schemes // *J. of Fluid Mechanics*. 2005. Vol. 535. P. 189–214.
5. *Günther T., Theisel, H.* The State of the Art in Vortex Extraction // *Computer Graphics Forum*. 2018. Vol. 37, No. 6. P. 149–173.
6. *Говорухин В.Н.* Алгоритм идентификации вихревых пятен на основе моделей точечных вихрей // *Известия высших учебных заведений. Северо-Кавказский регион*. 2020 г. - №-3. - стр. 11-18.

ОБ ОСОБЕННОСТЯХ МОДЕЛИРОВАНИЯ ФАЗОВОГО РАВНОВЕСИЯ ГЕЛИЙ СОДЕРЖАЩИХ СИСТЕМ¹

Малышев В.Л., Моисеева Е.Ф.

*ФГБОУ ВО Уфимский государственный нефтяной
технический университет, г. Уфа*

Введение

На сегодняшний день на Востоке России реализуется крупнейший инфраструктурный проект «Восточная газовая программа» направленный на формирование новых перспективных центров добычи и переработки природного газа на территории Восточной Сибири и Дальнего Востока России. Данный проект включает два уникальных месторождения – Чаяндинское и Ковыктинское – имеющие многокомпонентный состав флюида, с высоким содержанием гелия. Данный компонент является стратегически важным сырьем, так как применяется во многих отраслях хозяйства, являющихся основой для экономического роста страны.

Следует отметить, что получение гелия из добываемого флюида рентабельно при его содержании более 0,055 % в составе природного газа. На данных месторождениях содержание гелия доходит до 0,65 % на Чаяндинском месторождении и до 0,3 % на Ковыктинском.

Получение гелия из природного газа можно разбить на два этапа. На первом этапе в процессе низкотемпературной конденсации получается гелиевый концентрат, в котором объемная доля гелия составляет не менее 80%. На втором этапе гелиевый концентрат очищается от примесей метана, азота, водорода, неона, аргона [1]. Для моделирования условий дистилляции необходимы уравнения состояния, позволяющие прогнозировать парожидкостное равновесие в широком диапазоне условий с максимально возможной точностью. Это необходимо для исключения погрешности в значениях показателей технологических процессов.

Описание парожидкостного равновесия, зачастую, основывается на использовании классического для нефтегазовой отрасли уравнения состояния Пенга-Робинсона. Однако, в работе [2] отмечается, что существуют значительные расхождения при моделировании гелионосных систем на основе данного уравнения состояния.

В представленной работе авторами рассмотрены особенности моделирования фазового равновесия гелий содержащих систем. Определены оптимальные коэффициенты парного взаимодействия для бинарных гелиевых

¹Работа выполнено при финансовой поддержке гранта Президента РФ в рамках научного проекта МК-1102.2020.8

систем, содержащих азот, аргон, диоксид углерода, метан, этан, пропан, изо-бутан и н-бутан, позволяющие значительно повысить точность расчета фазового равновесия.

I Математическая модель

Одним из уравнений состояния, получивших широчайшее распространение при моделировании фазовых состояний углеводородов, является уравнение состояния Пенга-Робинсона [3]:

$$P = \frac{RT}{V - b} - \frac{a}{V(V + b) + b(V - b)}$$

где a, b – коэффициенты, V – мольный объем, R – универсальная газовая постоянная, P – давление, T – температура. Особенности вычисления коэффициентов вышеуказанного уравнения можно найти в работе [4].

Классический расчет фазового равновесия системы «пар-жидкость» подразумевает определение компонентных составов паровой и жидкой фазы для смесей заданного состава при определенном давлении и температуре. Алгоритм расчета включает в себя: задание начальных коэффициентов распределения K_i в соответствии с корреляцией Вильсона; решение уравнения Речфорда-Райса; нахождение мольных долей жидкой и паровой фаз; вычисление коэффициента сверхсжимаемости и летучести в каждой из фаз [5].

II Результаты

На многих месторождениях в составе природного газа наблюдается лишь незначительное количество примеси гелия и его содержание зачастую существенно не влияет на фазовую диаграмму. В вопросах отделения гелиевого концентрата, учёт гелия при моделировании фазового равновесия становится основополагающим. Из рисунка 1 видно, что фазовая диаграмма смеси гелий-метан, построенная на основе уравнения состояния Пенга-Робинсона при температуре 170 К и табличных значениях критических констант ($T_c = 5,19$ К, $P_c = 0,227$ МПа, $\omega = -0,365$) имеет существенное расхождение с экспериментальными данными.

В уравнении состояния при расчете коэффициента a используется параметр c_{ij} (коэффициент парного взаимодействия), который позволяет «настраивать» модель на экспериментальные результаты. При отсутствии экспериментальных данных, альтернативой уравнениям состояния может служить метод молекулярной динамики [6]. В литературе, в связи с малым количеством гелия в большинстве месторождений, данный коэффициент, зачастую, отсутствует, а в коммерческих программных продуктах скрыт

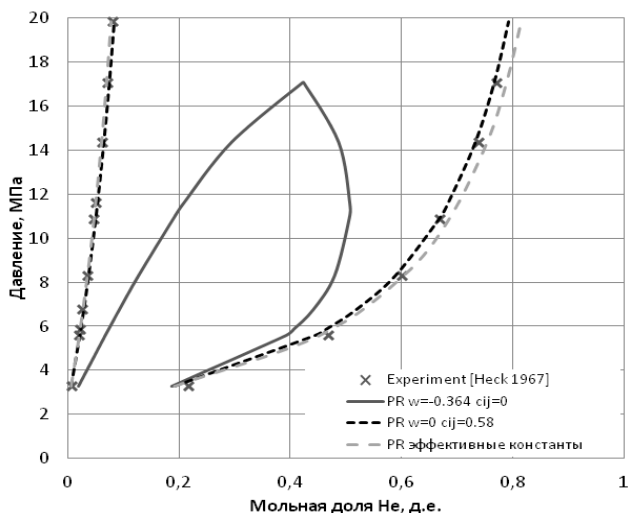


Рис. 1. Сопоставление различных методов построения фазовой диаграммы гелий-метан при температуре 170 К

от пользователя. В представленной работе настройка параметров уравнения состояния позволила значительно улучшить результат прогнозирования фазового равновесия для системы «гелий-метан».

Аналогичным образом были рассмотрены восемь бинарных систем, содержащих гелий: «гелий-азот», «гелий-аргон», «гелий-диоксид углерода», «гелий-метан», «гелий-этан», «гелий-пропан», «гелий-изо-бутан» и «гелий-н-бутан». Для каждой из этих пар были определены оптимальные значения коэффициентов парного взаимодействия c_{ij}^{opt} , которые представлены в таблице 1.

Таблица 1. Название таблицы

Бинарная смесь(+гелий)	c_{ij}^{opt}
Ar	-0,30
N_2	-0,38
CO_2	0,82
CH_4	0,58
C_2H_6	1,10
C_3H_8	1,09
$n - C_4H_{10}$	1,05
$i - C_4H_{10}$	1,55

III Заключение

Анализ тысячи экспериментальных точек для 8 бинарных гелиевых систем дает возможность определить оптимальные коэффициенты парного взаимодействия, позволяющие значительно повысить точность вычисления парожидкостного равновесия данных систем. Изучение различных методик оптимизации уравнения состояния позволило установить, что для корректных расчетов конденсации гелия необходимо использование ацентрического фактора $\omega = 0$ и оптимальных коэффициентов парного взаимодействия, представленных в работе.

Литература

1. *Копша, Д. П., Сиротин, С. А., Мамаев, А. В., Курятников, А. А.* Исследование влияния гелия на фазовые равновесия углеводородных смесей с использованием уравнения состояния Пенга-Робинсона // Научно-технический сборник Вести газовой науки. 2015. Т. 1. С. 51–56.
2. *Копша, Д. П., Сиротин, С. А., Никифоров, В. Н., Бахметьев, А. П.* Исследование и моделирование фазового равновесия газовых смесей с гелием // Научно-технический сборник Вести газовой науки. 2012. Т. 2. С. 106–112.
3. *Malyshev, V.L., Nurgalieva, Y.F., Moiseeva, E.F.* Comparative study of empirical correlations and equations of state effectiveness for compressibility factor of natural gas determination // Periodico Tchê Quimica. 2021. V 18. N 38. P. 188–213.
4. *Малышев, В.Л., Моисеева, Е.Ф., Калиновский, Ю.В.* Сравнительный анализ определения термодинамических свойств метана на основе уравнения состояния Пенга-Робинсона и метода молекулярной динамики // SOCAR Proceedings. 2018. N 2. P. 33–40.
5. *Малышев, В.Л., Моисеева, Е.Ф.* Анализ различных подходов к точному прогнозированию фазового равновесия бинарных гелиевых систем на основе уравнения состояния Пенга-Робинсона // SOCAR Proceedings. 2020. N 4. P. 117–126.
6. *Moiseeva, E.F., Malyshev, V.L.* Compressibility factor of natural gas determination by means of molecular dynamics simulation // AIP Advances. 2019. V. 9. N. 5 P.055108

ЭФФЕКТИВНЫЕ КОСОЭРМИТОВЫ ПРЕДОБУСЛОВЛИВАТЕЛИ ДЛЯ РЕШЕНИЯ СЕДЛОВЫХ ЗАДАЧ¹

Мартынова Т.С., Муратова Г.В., Шабас И.Н.

ЮФУ, Институт математики, механики и компьютерных наук им. Воровича И.И., Ростов-на-Дону

Введение

Теория итерационных методов для систем линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) обширна и достаточно развита. При решении СЛАУ одним из ключевых понятий является предобусловливание, т.е. выбор некоторых матриц, существенно влияющих на скорость сходимости методов.

Одним из актуальных направлений в теории итерационных методов является ее развитие для решения широкого класса седловых задач. Для решения СЛАУ большой размерности, как правило, используются методы подпространств Крылова, такие как GMRES, но они имеют слабую скорость сходимости, когда применяются к седловым задачам. Поэтому требуется создание хороших предобусловливателей для того, чтобы улучшить скорость сходимости данных методов.

Рассмотрим итерационное решение большой разреженной СЛАУ

$$Av = b, \quad b \in \mathbb{C}^n, \quad (1)$$

где $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ – неэрмитова положительно определенная матрица.

Предобусловливание означает, что система (1) заменяется системой $B^{-1}Av = B^{-1}b$, где матрица B есть приближение к A со следующими свойствами: матрица $B^{-1}A$ лучше обусловлена, и система $Bv = b$ решается легко. Продуманный выбор B может сделать число обусловленности матрицы $B^{-1}A$ много меньшим числа обусловленности матрицы A и тем самым ускорить сходимость. Вместе с тем, на данный момент не существует единой теории предобусловливания. В ряде случаев удается добиться локализации спектра предобусловленной матрицы около единицы, иногда стремятся к тому, чтобы матрица $B^{-1}A$ имела небольшое число собственных значений на периферии своего спектра. Таким образом, большая часть современных исследований по итерационным методам ориентирована на отыскание эффективных предобусловливателей.

¹Работа выполнена при финансовой поддержке Правительства РФ, грант № 075-15-2019-1928

I Итерационные методы решения СЛАУ с сильно неэрмитовой матрицей

Матрицу A системы (1) представим в виде суммы эрмитовой и косоэрмитовой частей

$$A = A_0 + A_1, \quad (2)$$

где

$$A_0 = \frac{1}{2}(A + A^*), \quad A_1 = \frac{1}{2}(A - A^*). \quad (3)$$

Положительная определенность A означает, что для любого $x \in \mathbb{C}^n \setminus \{0\}$, $x^* A_0 x > 0$. Пусть в некоторой матричной норме $\|\cdot\|$, $\|A_0\| \ll \|A_1\|$, т.е. матрица A является сильно неэрмитовой [1]. Эта ситуация возникает, например, при дискретизации уравнений Навье-Стокса, когда конвективные члены сильно доминируют [2]. Кроме того, в данной работе предполагается, что $\text{diag}(A_1) = 0$. Это условие удовлетворяется автоматически, если элементы матрицы A вещественные.

Представим косоэрмитовую часть A_1 матрицы A в виде

$$A_1 = K_L + K_U, \quad (4)$$

где K_L и K_U строго нижне- и верхнетреугольная матрица соответственно. Очевидно, что $K_L = -K_U^*$.

На основе расщеплений (2)-(4) в [3, 4, 5] предложены классы треугольных (ТКМ) и попеременно-треугольных (ПТКМ) косоэрмитовых (кососимметрических) итерационных методов для решения системы (1). В данной работе рассматриваются методы, относящиеся к ПТКМ.

Метод ПТКМ [5]. Пусть задано начальное приближение $v^{(0)}$ и положительные параметры ω и τ . Для $p = 0, 1, \dots$ до достижения сходимости последовательности приближений $\{v^{(p)}\}$ вычислять:

$$v^{(p+1)} = G(\omega, \tau)v^{(p)} + \tau B(\omega)^{-1}b,$$

где $G(\omega, \tau) = B(\omega)^{-1}(B(\omega) - \tau A)$, а $B(\omega) \in \mathbb{C}^{n \times n}$ определяется следующим образом:

$$B(\omega) = (B_c + \frac{\omega}{2}K_L)B_c^{-1}(B_c + \frac{\omega}{2}K_U).$$

Здесь $B_c \in \mathbb{C}^{n \times n}$ – эрмитова положительно определенная матрица.

В [6] исследован двухпараметрический метод, для которого

$$B(\omega_1, \omega_2) = (B_c + \omega_1 K_L)B_c^{-1}(B_c + \omega_2 K_U), \quad (5)$$

где ω_1 и ω_2 – неотрицательные параметры, не равные нулю одновременно.

В [7, 8] предложен двухшаговый косоэрмитов итерационный метод (ДКМ), даны достаточные условия сходимости метода и выбор оптимальных итерационных параметров. Матрица $B(\omega)$ для ДКМ имеет вид

$$B(\omega) = (B_c + \frac{\omega}{2}\widehat{K}_L)B_c^{-1}(B_c + \frac{\omega}{2}\widehat{K}_U), \quad (6)$$

где $\widehat{K}_L = K_L + H_0$, $\widehat{K}_U = K_U - H_0$, $H_0 \in \mathbb{C}^{n \times n}$ – некоторая эрмитова матрица, $B_c \in \mathbb{C}^{n \times n}$ – эрмитова положительно определенная матрица. Очевидно, что $\widehat{K}_L = -\widehat{K}_U^*$, $A_1 = (K_L + H_0) + (K_U - H_0) = \widehat{K}_L + \widehat{K}_U$.

В случае, когда $H_0 = 0$, ДКМ сводится к ПТКМ; специальный выбор матрицы H_0 позволяет улучшить сходимость метода.

В [9] авторами предложен обобщенный косоэрмитов треугольный метод GSTS (Generalized Skew-Hermitian Triangular Splitting) для решения седловых СЛАУ, блочно-структурированная матрица которых имеет положительно определенный $(1, 1)$ блок.

В данной работе исследуются свойства матрицы $B(\omega)$ из (6), используемой в качестве предобусловливателя для решения СЛАУ (1). Для седловых задач рассмотрен более общий случай, когда $(1, 1)$ матричный блок блочно-структурированной СЛАУ является положительно полуопределенным или вырожденным. Для решения СЛАУ с такой матрицей используется метод расширенного Лагранжиана. Доказана теорема о распределении спектра матрицы $\mathcal{B}^{-1}(\omega_1, \omega_2)\mathcal{A}$, где предобусловливатель $\mathcal{B}(\omega_1, \omega_2)$ есть обобщение $B(\omega_1, \omega_2)$ из (5) для седловых задач.

II Предобусловливание СЛАУ с седловой матрицей

Характерной задачей, приводящей к решению СЛАУ с седловой матрицей, является следующая задача квадратичного программирования: необходимо найти минимум u целевого функционала $J(u) \equiv \frac{1}{2}u^*Mu - u^*f$ при наличии $q \leq p$ линейных ограничений $Eu = g$:

$$\begin{pmatrix} M & E^* \\ E & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ \mu \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f \\ g \end{pmatrix}, \quad (7)$$

где $M = M^* \in \mathbb{C}^{p \times p}$ – положительно полуопределенная матрица, $E \in \mathbb{C}^{q \times p}$ – прямоугольная матрица полного ранга, $q \leq p$, $u, f \in \mathbb{C}^p$, $\mu, g \in \mathbb{C}^q$. Данной задаче соответствует функционал Лагранжа $\mathcal{L}(u, \mu) = J(u) + \mu^*(Eu - g)$, где μ – вектор Лагранжевых множителей. Заметим, что матрица блочно-структурированной СЛАУ (7) невырождена тогда и только тогда, когда [10]:

$$\begin{cases} \text{rank}(E^*) = q, \\ \ker(E) \cap \ker(M) = \{0\}. \end{cases}$$

Преобразуем (7) к эквивалентной неэрмитовой СЛАУ, матрица которой имеет спектр, лежащий в правой полуплоскости [11]:

$$\begin{pmatrix} M & E^* \\ -E & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ \mu \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f \\ -g \end{pmatrix}. \quad (8)$$

Рассмотрим случай, когда (1, 1) матричный блок полуопределен или вырожден. Будем использовать метод расширенного Лагранжиана, который состоит в замене (8) на СЛАУ

$$\mathbf{A}\mathbf{w} = \begin{pmatrix} \widetilde{M} & E^* \\ -E & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ \mu \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f + \gamma E^* g \\ -g \end{pmatrix} = \mathbf{F}, \quad (9)$$

в которой M заменяется на матрицу $\widetilde{M} \equiv M + \gamma E^* E$, являющуюся положительно определенной для всех $\gamma > 0$, если E имеет полный ранг. Очевидно, что (9) имеет то же самое решение, что и (8). Наиболее эффективен выбор $\gamma = \|M\|_2 / \|E\|_2^2$ [12]. В этом случае число обусловленности как (1, 1) блока, так и всей матрицы коэффициентов является наименьшим.

Представим матрицу \mathcal{A} из (9), аналогично (2), в виде суммы ее эрмитовой и косоэрмитовой составляющих:

$$\mathcal{A} = \mathcal{A}_0 + \mathcal{A}_1, \quad \mathcal{A}_0 = \begin{bmatrix} \widetilde{M} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \mathcal{A}_1 = \begin{bmatrix} 0 & E^* \\ -E & 0 \end{bmatrix}.$$

Косоэрмитову матрицу \mathcal{A}_1 , в свою очередь, представим в виде:

$$\mathcal{A}_1 = \mathcal{K}_L + \mathcal{K}_U = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ -E & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & E^* \\ 0 & 0 \end{bmatrix},$$

где 0 – нулевая матрица подходящей размерности, \mathcal{K}_L и \mathcal{K}_U – строго нижне- и строго верхнетреугольные матрицы, $\mathcal{K}_L = -\mathcal{K}_U^*$.

Определим матрицу \mathcal{B}_C следующим образом: $\mathcal{B}_C = \begin{bmatrix} B_1 & 0 \\ 0 & B_2 \end{bmatrix}$, где B_1 и B_2 – эрмитовы невырожденные матрицы.

Метод GSTS [9]. Пусть задано начальное приближение $\mathbf{w}^{(0)} = (u^{(0)}, \mu^{(0)}) \in \mathbb{C}^{(p+d)}$, и положительный итерационный параметр τ . Для $k = 0, 1, 2, \dots$ до достижения сходимости последовательности итерационных приближений $\{\mathbf{w}^{(k)}\}$, вычислять

$$\begin{cases} B_2 \mu^{(k+1)} = B_2 \mu^{(k)} + \tau [\omega_1 E B_1^{-1} (f - M u^{(k)} - E^* \mu^{(k)}) + E u^{(k)} - g], \\ B_1 u^{(k+1)} = B_1 u^{(k)} - \tau M u^{(k)} + E^* [(\omega_2 - \tau) \mu^{(k)} - \omega_2 \mu^{(k+1)}] + \tau f, \end{cases}$$

где ω_1 и ω_2 неотрицательные параметры, не равные нулю одновременно.

GSTS-предобусловливатель определяется следующим образом [9]:

$$\mathcal{B}(\omega_1, \omega_2) = (\mathcal{B}_C + \omega_1 \mathcal{K}_L) \mathcal{B}_C^{-1} (\mathcal{B}_C + \omega_2 \mathcal{K}_U) \quad (10)$$

или, в блочной форме,

$$\mathcal{B}(\omega_1, \omega_2) = \begin{bmatrix} B_1 & \omega_2 E^* \\ -\omega_1 E & B_2 - \omega_1 \omega_2 E B_1^{-1} E^* \end{bmatrix},$$

где ω_1 и ω_2 – неотрицательные параметры, не равные нулю одновременно.

Возьмем в качестве матрицы $B_1 = \widetilde{M}$. Способы выбора матрицы B_2 рассмотрим позднее. Тогда

$$\mathcal{B}(\omega_1, \omega_2) = \begin{bmatrix} \widetilde{M} & \omega_2 E^* \\ -\omega_1 E & B_2 - \omega_1 \omega_2 E \widetilde{M}^{-1} E^* \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \widetilde{M} & \omega_2 E^* \\ -\omega_1 E & B_2 - \omega_1 \omega_2 \widetilde{S} \end{bmatrix},$$

где $\widetilde{S} = E \widetilde{M}^{-1} E^*$ – дополнение Шура для \widetilde{M} .

Предобусловленная (слева) блочная СЛАУ имеет вид:

$$\mathcal{B}^{-1}(\omega_1, \omega_2) \mathcal{A} \mathbf{w} = \mathcal{B}^{-1}(\omega_1, \omega_2) \mathbf{F}. \quad (11)$$

Исследуем спектр предобусловленной матрицы из (11).

Теорема 1. Пусть матрицы \mathcal{A} и $\mathcal{B}(\omega_1, \omega_2)$ определяются (9) и (10), соответственно, и $B_1 = \widetilde{M}$. Пусть $\lambda \in \sigma(\mathcal{B}^{-1}(\omega_1, \omega_2) \mathcal{A})$. Тогда для собственных чисел предобусловленной матрицы имеет место выражение

$$\lambda = \frac{\nu - \tilde{\omega} \xi \pm \sqrt{(\nu - \tilde{\omega} \xi)^2 - 4 \xi \nu}}{2\nu},$$

где $\xi = \frac{z^* \tilde{S} z}{z^* z}$, $\nu = \frac{z^* B_2 z}{z^* z}$, а параметр $\tilde{\omega} = \omega_1 \omega_2 - \omega_1 - \omega_2$.

Доказательство. Пусть $\lambda \in \sigma(\mathcal{B}^{-1}(\omega_1, \omega_2) \mathcal{A})$ и $(y^*, z^*)^* \in \mathbb{C}^{p+q}$ – соответствующий собственный вектор, где $y \in \mathbb{C}^p$, $z \in \mathbb{C}^q$. Тогда имеем

$$\begin{bmatrix} \widetilde{M} & E^* \\ -E & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y \\ z \end{bmatrix} = \lambda \begin{bmatrix} \widetilde{M} & \omega_2 E^* \\ -\omega_1 E & B_2 - \omega_1 \omega_2 \widetilde{S} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y \\ z \end{bmatrix}$$

или, эквивалентно,

$$\begin{cases} (1 - \lambda) \widetilde{M} y = (\lambda \omega_2 - 1) E^* z, \\ (\lambda \omega_1 - 1) E y = \lambda B_2 z - \lambda \omega_1 \omega_2 \widetilde{S} z. \end{cases} \quad (12)$$

Пусть $\lambda \neq 1$. Иначе, если $\lambda = 1$, уравнения (12) сводятся к

$$\begin{cases} (\omega_2 - 1) E^* z = 0, \\ (\omega_1 - 1) E y = B_2 z - \omega_1 \omega_2 \widetilde{S} z, \end{cases} \quad (13)$$

и существует ненулевой вектор $(y_1^*, 0)^* \in \mathbb{C}^{p+q} \setminus \{0\}$ такой, что уравнения (13) справедливы для $y_1 \in \mathbb{C}^p \setminus \{0\}$. Если $\lambda \neq 1$, то из первого уравнения (12) имеем:

$$y = \frac{\lambda\omega_2 - 1}{1 - \lambda} \widetilde{M}^{-1} E^* z.$$

Подставляя это соотношение во второе уравнение в (12), получаем

$$\left(\frac{(\lambda\omega_1 - 1)(\lambda\omega_2 - 1)}{1 - \lambda} + \lambda\omega_1\omega_2 \right) \widetilde{S}z = \lambda B_2 z,$$

или

$$(\lambda\tilde{\omega} + 1)\widetilde{S}z = \lambda(1 - \lambda)B_2 z, \tag{14}$$

где $\tilde{\omega} = \omega_1\omega_2 - \omega_1 - \omega_2$. Для удобства введем величины $\xi = \frac{z^* \widetilde{S}z}{z^* z}$, $\nu = \frac{z^* B_2 z}{z^* z}$, тогда, после умножения (14) слева на z^* и деления на $z^* z$ обеих частей этого выражения, получаем:

$$(\lambda\tilde{\omega} + 1)\xi = \lambda(1 - \lambda)\nu,$$

т.е. λ является корнем квадратного уравнения

$$\nu\lambda^2 - (\nu - \tilde{\omega}\xi)\lambda + \xi = 0. \tag{15}$$

Из (15) непосредственно следует утверждение Теоремы 1.

Заметим, что когда $\tilde{\omega} = -1$, корнями (15) являются $\lambda = 1$ и $\lambda = \xi/\nu$.

Практический вывод, который следует из доказанной теоремы, следующий. Если $\tilde{\omega} = -1$ и $\xi = \nu$, то все собственные числа предобусловленной матрицы $\mathcal{B}^{-1}(\omega_1, \omega_2)\mathcal{A}$ равны 1, а это означает, что для эффективности рассмотренного предобусловливателя матрица B_2 должна максимально удачно аппроксимировать дополнение Шура \tilde{S} .

Литература

1. Крукиер Л.А. Неявные разностные схемы и итерационный метод их решения для одного класса систем квазилинейных уравнений. Изв. ВУЗов, Матем. 1979. № 7. с. 41–52.
2. Крукиер Л.А. Кососимметричные итерационные методы решения стационарного уравнения конвекции - диффузии с малым параметром при старшей производной. Изв. ВУЗов, Матем. 1997. № 4. с. 74–85.
3. Krukier L.A. Convergence acceleration of triangular iterative methods based on the skew-symmetric part of the matrix // Appl. Numer. Math. 1999. Vol. 30. P. 281–290.

4. *Krukier L.A., Chikina L.G., Belokon T.V.* Triangular skew-symmetric iterative solvers for strongly nonsymmetric positive real linear system of equations // *Appl. Numer. Math.* 2002. Vol. 41, P. 89–105.
5. *Бочев М.А., Крукиер Л.А.* Об итерационном решении сильно несимметричных систем линейных алгебраических уравнений // *ЖВМ и МФ.* 1997. № 37(11). с. 1283–1293.
6. *L.G. Chikina, B.L. Krukier* Solution of linear equation systems with a dominant skew-symmetric part using the product triangular iterative method // *Comput. methods in applied math.* 2003. Vol. 3. N 4. P. 647–650.
7. *Krukier L.A., Martynova T.S., Bai Z.-Z.* Product-Type Skew-Hermitian Triangular Splitting Iteration Methods for Strongly Non-Hermitian Positive Definite Linear Systems // *Journal of Computational and Applied Mathematics.* 2009. Vol. 232. N 1. P. 3–16.
8. *Бай З.З., Крукиер Л.А., Мартынова Т.С.* Двухшаговые итерационные методы решения стационарного уравнения конвекции-диффузии с малым параметром при старшей производной на равномерной сетке // *ЖВМ и МФ.* 2006. № 46(2). с. 295–306.
9. *Krukier L.A., Krukier B.L., Ren Z.-R.* Generalized skew-Hermitian triangular splitting iteration methods for saddle-point linear systems // *Numer. Linear Algebra Appl.* 2014. Vol. 21. P. 152–170.
10. *Z.-Z. Bai, G.H. Golub, J.-Y. Pan* Preconditioned Hermitian and skew-Hermitian splitting methods for non-Hermitian positive semidefinite linear systems // *Numerische Mathematik.* 2004. Vol. 98. P. 1–32.
11. *Benzi M., Golub G.H.* A preconditioner for generalized saddle point problems // *SIAM J. Matrix Anal. Appl.* 2004. Vol. 26. P. 20–41.
12. *G.H. Golub, C. Greif* On solving block-structured indefinite linear systems // *SIAM Journal on Scientific Computing.* 2003. Vol. 24. P. 2076–2092.

ЭКСПЕРИМЕНТЫ С БАЗОВОЙ МОДЕЛЬЮ ВЛАСТНОЙ ИЕРАРХИИ С НЕКОМПЕТЕННОСТЬЮ И КОРРУПЦИЕЙ: ПЕРВЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ¹

Михайлов А.П. *, Петров А.П. *, Подлипская О.Г. **,
Прончев Г.Б. *** ,

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

** *Московский физико-технический институт (национальный
исследовательский университет), Долгопрудный*

*** *Социологический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова,
Москва*

Введение

Необходимость существования иерархии в "сложных" социально-политических системах обусловлена тем, что управление в таких системах связано с получением, переработкой и использованием больших массивов данных [1]. Управленческая иерархия позволяет полностью персонализировать управленческий процесс в "сложной" системе, однозначно идентифицировать выполняемые на различных уровнях иерархии функции, права и ответственность. На нижележащих уровнях управления обрабатывается более конкретная и детальная информация, охватывающая лишь отдельные стороны функционирования системы, которая передается затем на более высокий уровень. На более высокие уровни управления поступает обобщенная информация, на базе которой принимаются управленческие решения, относящиеся к системе в целом.

К сожалению, иерархии, существующие в социально-политической и социально-экономической системах, несовершенны. Среди различных причин наиболее важными являются "коррупция" и "некомпетентность" [1, 2, 3]. Возможность существования коррупции прямо зависит от монополии государства на выполнение определенных видов деятельности и от отсутствия контроля за деятельностью отдельных чиновников. В то же время, наблюдается зависимость от вероятности и тяжести наказаний за коррупционные деяния [4].

Один из известных управленческих принципов (т.н. принцип Питера) гласит: "В иерархии каждый служащий стремится достичь своего уровня некомпетентности" [3]. Управленец может переходить на новую ступень в иерархии до тех пор, пока не займёт место, на котором он окажется не

¹Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ 19-01-00089

в состоянии справиться со своими обязанностями, т.е. окажется некомпетентным. Этот уровень называется "уровнем некомпетентности" конкретного управленца.

До настоящего времени влияние коррупции и некомпетентности на иерархию власти изучались по отдельности. Наиболее изученной является коррупция, при этом, большая часть работ базируется на подходе Номо Economicus, и предметом моделирования в них является не иерархия в целом, а отдельная инстанция (и ее взаимодействие со своим окружением). Первыми работами, в которых привлекались математические модели для изучения коррупции, были [5, 6]. Позднее феномен коррупции исследовался с помощью теоретико-игровых методов [7, 8]. Рассматривалось возникновение коррупции в системе принципал-агент-супервайзер, коррупция в иерархических структурах различных простейших топологий, исследовался вопрос об эффективности предоставляемых услуг при наличии возможности коррупции, и так далее. Также существует множество эмпирических работ о коррупции на уровне стран (например, [9]) и на уровне отдельных организаций [10]. Если говорить об отечественных публикациях, то можно выделить работу [11], посвященную вопросу об устройстве контролирующих коррупцию организаций, а также статью [12], в которой предложена имитационная модель коррупционного поведения в иерархических системах, учитывающая индивидуальные стратегии отдельных элементов и позволяющая описывать коллективное поведение достаточно больших групп.

Данная работа является первой, рассматривающей их совместное влияние коррупции и некомпетентности на властные процессы. Анализ проводится на основе системно-социального подхода, предполагающего, что объектом моделирования является не отдельная инстанция, а иерархия в целом. Другими словами, предпосылки базовой модели "Власть – Общество" изменяются таким образом, чтобы учесть поведенческие характеристики коррумпированных и некомпетентных инстанций.

Отметим, что конкуренция аналогичных подходов имеет место и в других областях математического моделирования социальных процессов: такие работы, как [13, 14, 15, 16], концентрируются на отдельных агентах, другие [17, 18, 19] рассматривают социум как целостную социальную систему; третьи (напр., [20, 21, 22, 23]) выявляют эмпирические закономерности.

I Модель

Уравнение базовой модели "Власть-Общество" имеет вид

$$\frac{\partial p}{\partial p} = \frac{\partial}{\partial t} \left[\kappa \left(p, \frac{\partial p}{\partial x}, x, t \right) \frac{\partial p}{\partial x} \right] + F(p, x, t) + \int_0^1 \chi(p(x', t), p(x, t) x', x) [p(x', t) - p(x, t)] dx'. \quad (1)$$

Здесь иерархия считается некоррумпированной и компетентной. Уровень инстанции в иерархии обозначен через x , при этом $x = 0$ соответствует высшему уровню иерархии, $x = 1$ – низшему. Количество власти, реализуемой инстанцией x в момент времени t , обозначено через $p(x, t)$. Коэффициент $\kappa \left(p, \frac{\partial p}{\partial x}, x, t \right)$ имеет смысл величины, обратной "ответственности" инстанций иерархии (далее будем считать его постоянным), функция $F(p, x, t)$ описывает реакцию общества на текущее распределение власти. Интегральный член соответствует так называемому механизму команд "через голову" то есть передаче власти не от начальника к непосредственному подчиненному, а к некоторым или сразу всем нижестоящим инстанциям.

Уравнение (1) рассматривается с краевыми условиями

$$\frac{\partial p}{\partial x} \Big|_{x=0} = \frac{\partial p}{\partial x} \Big|_{x=1} = 0. \quad (2)$$

имеющими смысл отсутствия потоков власти через границы иерархии, а начальное условие

$$p(x, 0) = p^0(x) \quad (3)$$

описывает исходное распределение власти в иерархии.

Далее будем рассматривать ситуацию, когда команды "через голову" отсутствуют, а реакция общества линейна. Тогда уравнение (1) принимает вид

$$\frac{\partial p(x, t)}{\partial t} = \kappa \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} + (p^0(x) - p(x, 0)). \quad (4)$$

В случае иерархии с некомпетентной и коррумпированной иерархией модель усложняется:

$$\frac{\partial p(x, t)}{\partial t} = (\alpha(1 + b_+ - b_-) + (1 - \alpha)(1 + c_+ - c_-)) \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} + (p^0(x) - p(x, 0)). \quad (5)$$

Коэффициенты c_{\pm} в данном уравнения описывают влияние смысл коррумпции сверхдействия и бездействия, b_{\pm} – некомпетентности сверхдействия и бездействия; α – доля некомпетентности в общем числе несовершенств.

В численных экспериментах в качестве начального условия выбрана функция

$$p(x, 0) = 1 - x. \quad (6)$$

Краевые условия:

$$p'(0) = 0, p'(1) = p(1). \quad (7)$$

Общий относительный ущерб и общая относительная стоимость подавления коррупции в иерархии даются, соответственно, формулами

$$D(t) = \frac{\int_0^1 (\alpha(b_- + b_+) + (1 - \alpha)(c_- + c_+)) \kappa(x) \frac{\partial p}{\partial x} dx}{\int_0^1 (1 - \alpha b_- - (1 - \alpha)c_-) \kappa(x) \frac{\partial p}{\partial x} dx},$$

$$V(t) = \frac{\int_0^1 p(x, t) \left[(\alpha \varepsilon_1 (b_+ + b_-) + (1 - \alpha) \varepsilon_2 (c_- + c_+)) \kappa(x) \frac{\partial p}{\partial x} \right]^{-1} dx}{\int_0^1 \left[(1 - \alpha \varepsilon_1 b_- - (1 - \alpha) \varepsilon_2 c_-) \kappa(x) \frac{\partial p}{\partial x} \right]^{-1} dx \int_0^1 p^0(x) dx}.$$

Под стратегией подавления, например, коррупции, понимается направленность антикоррупционных мер преимущественно против определенных уровней иерархии. Именно, будем говорить о стратегии преимущественного подавления коррупции среди старших инстанций, если коррумпированность среди этих инстанций уменьшилась в результате применения антикоррупционных мер сильнее, чем в средней и нижней частях иерархии (Рис. 1). Аналогично вводятся стратегии преимущественного подавления коррупции среди младших, средних и крайних инстанций. Аналогично определяются стратегии подавления некомпетентности. Стратегия подавления обоих несовершенств – это их комбинация; например, подавление старших инстанций в части коррупции и подавление крайних в части некомпетентности.

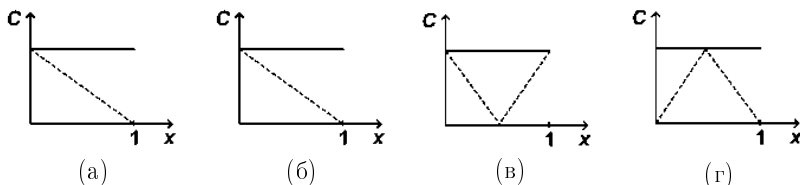


Рис. 1. Стратегии подавления коррупции: подавление старших инстанций (а), младших (б), средних (в), крайних (г). Коррумпированность "до применения мер" обозначена сплошной линией, "после применения" – пунктиром.

Эффективность стратегии – это отношение предотвращенного ущерба к стоимости соответствующих мер:

$$E(t) = \frac{\Delta D}{\Delta V} = \frac{D(\text{after}) - D(\text{before})}{V(\text{after}) - V(\text{before})}, \quad (8)$$

где "after" и "before" означают, соответственно, ситуации до и после применения стратегии уменьшения несовершенств иерархии, ΔV – стоимость этой стратегии, ΔD – уменьшение наносимого несовершенствами ущерба, обусловленное примененной стратегией.

Общая схема численного исследования состоит в переборе различных стратегий и вычислении эффективности каждой из них для иерархий с различной степенью централизованности. Под большей или меньшей централизованностью здесь понимается, соответственно, большее или меньшее количество власти у высших инстанций по сравнению с суммарной властью всей иерархии (Рис. 1).

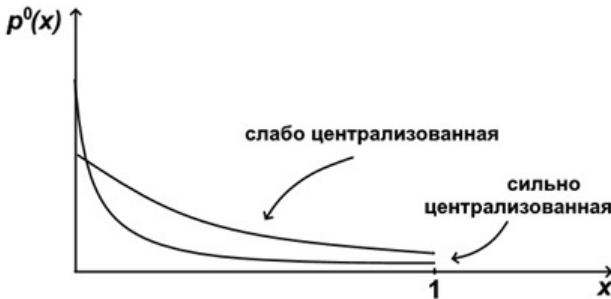


Рис. 2. Типичное распределение власти в слабо централизованной и в сильно централизованной иерархиях

II Результаты

В ячейках таблиц данного раздела в представлены значения эффективности, вычисленные по формуле (8). Строкам соответствуют стратегии подавления некомпетентности, по столбцам – стратегии подавления коррупции.

II.1 Слабо централизованные иерархии

1) $\varepsilon_1 = 1; \varepsilon_2 = 5, \alpha = 0.5, p^0 = \sqrt{1 - 0.99x}$, есть коррупция бездействия и некомпетентность сверхдействия; 10% старших инстанций имеют 0.1558 от всей власти.

2) $\varepsilon_1 = 1; \varepsilon_2 = 5, \alpha = 0.5, p^0 = \sqrt{1 - 0.99x}$, есть только коррупция и некомпетентность бездействия; 10% старших инстанций имеют 0.1576 от всей власти.

3) $\varepsilon_1 = 1; \varepsilon_2 = 1, \alpha = 0.5, p^0 = \sqrt{1 - 0.99x}$, есть коррупция бездействия и некомпетентность сверхдействия; 10% старших инстанций имеют 0.1558 от всей власти.

Таблица 1. Результаты эксперимента 1

Подавление	Старших	Младших	Крайних	Средних
Старших	0.0271	-0.1096	0.1152	-0.0703
Младших	-0.0439	0.1192	0.6672	-0.2641
Крайних	-0.0205	-0.0561	0.5061	0.6576
Средних	-0.0066	0.0709	0.1602	0.0677

Таблица 2. Результаты эксперимента 2

Подавление	Старших	Младших	Крайних	Средних
Старших	-0.9770	-3.7483	-2.98092	-5.5594
Младших	-1.3384	-2.4314	-67.4464	-5.5594
Крайних	-1.2019	-3.3258	0.4733	-1.4565
Средних	-1.1784	-3.0916	5.3995	-3.2583

Таблица 3. Результаты эксперимента 3

Подавление	Старших	Младших	Крайних	Средних
Старших	0.0268	-0.1089	0.0996	-0.0536
Младших	-0.0435	0.1254	0.9522	0.0884
Крайних	-0.0198	-0.0556	0.5025	0.2054
Средних	0.0067	0.0750	0.1866	0.0806

4) $\varepsilon_1 = 1; \varepsilon_2 = 1, \alpha = 0.5, p^0 = \sqrt{1 - 0.99x}$, есть только коррупция и некомпетентность бездействия; 10% старших инстанций имеют 0.1576 от всей власти.

Таблица 4. Результаты эксперимента 4

Подавление	Старших	Младших	Крайних	Средних
Старших	-0.9770	-5.2768	-6.3443	-5.6340
Младших	-1.8844	-2.4314	1.5731	-8.1384
Крайних	-1.2270	-3.2420	0.4733	-24.1059
Средних	-1.6208	-4.4342	11.8924	-3.2583

5) $\varepsilon_1 = 1; \varepsilon_2 = 5, \alpha = 0.2, p^0 = \sqrt{1 - 0.99x}$, есть коррупция бездействия и некомпетентность сверхдействия; 10% старших инстанций имеют 0.1568 от всей власти.

6) $\varepsilon_1 = 1; \varepsilon_2 = 5, \alpha = 0.2, p^0 = \sqrt{1 - 0.99x}$, есть только коррупция и некомпетентность бездействия; 10% старших инстанций имеют 0.1576 от всей власти.

Таблица 5. Результаты эксперимента 5

Подавление	Старших	Младших	Крайних	Средних
Старших	0.1405	0.1517	0.1236	-0.0613
Младших	0.0962	0.2353	0.0386	-0.1922
Крайних	0.1001	0.1678	0.6596	-0.1372
Средних	0.1374	0.2187	5.1147e-04	-0.0755

Таблица 6. Результаты эксперимента 6

Подавление	Старших	Младших	Крайних	Средних
Старших	-0.5066	-1.6524	-0.0833	0.3138
Младших	-0.7752	-1.2179	-0.1901	-0.0976
Крайних	-0.7375	-1.5360	-0.2086	-0.5172
Средних	-0.5693	-1.3743	-0.0663	0.6278

II.2 Сильно централизованная иерархия

7) $\varepsilon_1 = 1; \varepsilon_2 = 5, \alpha = 0.5, p^0 = \frac{1}{1+\exp(30(x-0.1))}$, есть коррупция бездействия и некомпетентность сверхдействия; 10% старших инстанций имеют 0.6837 от всей власти.

Таблица 7. Результаты эксперимента 7

Подавление	Старших	Младших	Крайних	Средних
Старших	0.0046	-0.0305	0.0385	0.0409
Младших	-0.0079	0.0350	0.2212	0.2021
Крайних	-0.0036	-0.0162	0.1682	-0.2681
Средних	8.5856e-04	0.0204	0.0535	4.0421e-04

8) $\varepsilon_1 = 1; \varepsilon_2 = 5, \alpha = 0.5, p^0 = \frac{1}{1+\exp(30(x-0.1))}$, есть только коррупция и некомпетентность бездействия; 10% старших инстанций имеют 0.7887 от всей власти.

Таблица 8. Результаты эксперимента 8

Подавление	Старших	Младших	Крайних	Средних
Старших	-0.1756	-1.1502	-0.6045	-0.6520
Младших	-0.2390	-0.7199	-12.3597	-1.4036
Крайних	-0.2139	-0.9914	0.2137	-2.4542
Средних	-0.2120	-0.9427	1.8564	-0.1280

9) $\varepsilon_1 = 1; \varepsilon_2 = 1, \alpha = 0.5, p^0 = \frac{1}{1+\exp(30(x-0.1))}$, есть коррупция бездействия и некомпетентность сверхдействия; 10% старших инстанций имеют 0.6873 от всей власти.

Таблица 9. Результаты эксперимента 9

Подавление	Старших	Младших	Крайних	Средних
Старших	0.0045	-0.0298	0.0335	0.0106
Младших	-0.0078	0.0366	0.3048	0.0344
Крайних	-0.0035	-0.0158	0.1654	0.1828
Средних	8.6876t-04	0.0213	0.0627	0.0038

10) $\varepsilon_1 = 1; \varepsilon_2 = 1, \alpha = 0.5, p^0 = \frac{1}{1+\exp(30(x-0.1))}$, есть только коррупция и некомпетентность бездействия; 10% старших инстанций имеют 0.7887 от всей власти.

Таблица 10. Результаты эксперимента 10

Подавление	Старших	Младших	Крайних	Средних
Старших	-0.1756	-1.6218	-1.0555	-0.5079
Младших	-0.3364	-0.7199	-0.9156	-3.8369
Крайних	-0.2172	-0.9566	0.2137	-4.6119
Средних	-0.2927	-1.3681	4.2268	-0.1280

11) $\varepsilon_1 = 1; \varepsilon_2 = 5, \alpha = 0.2, p^0 = \frac{1}{1+\exp(30(x-0.1))}$, есть коррупция бездействия и некомпетентность сверхдействия; 10% старших инстанций имеют 0.7397 от всей власти.

Таблица 11. Результаты эксперимента 11

Подавление	Старших	Младших	Крайних	Средних
Старших	0.0238	0.0383	0.0093	-0.0240
Младших	0.0164	0.0608	0.0013	-0.0693
Крайних	0.0170	0.0432	0.0269	-0.0483
Средних	0.0234	0.0554	-4.7991e-04	-0.0353

12) $\varepsilon_1 = 1; \varepsilon_2 = 5, \alpha = 0.2, p^0 = \frac{1}{1+\exp(30(x-0.1))}$, есть только коррупция и некомпетентность бездействия; 10% старших инстанций имеют 0.7887 от всей власти.

Таблица 12. Результаты эксперимента 12

Подавление	Старших	Младших	Крайних	Средних
Старших	-0.0867	-0.4394	0.0139	0.2512
Младших	-0.1320	-0.3167	-0.0136	0.1568
Крайних	-0.1257	-0.4007	-0.0076	0.0909
Средних	-0.0972	-0.3643	0.0026	0.3188

III Выводы

Наиболее очевидный вывод из приведенных экспериментов состоит в том, что подавление коррупции и некомпетентности часто имеет отрицательную эффективность. Именно, после применения мер зачастую становится «даже хуже».

Вторая закономерность полученных результатов – это то, что чаще всего нельзя даже предложить стратегию подавления коррупции, которая была бы лучшей независимо от выбранной стратегии подавления некомпетентности. Аналогично, нельзя предложить стратегию подавления некомпетентности, которая была бы лучшей независимо от выбранной стратегии подавления коррупции. Таким образом, решающее значение имеет сочетание стратегий.

Третий вывод: при выборе стратегии наименьшее значение имеет степень централизации. Сопоставляя результаты экспериментов 1 и 7 (различающихся лишь функцией p^0), нетрудно видеть, что в подавляющем большинстве случаев стратегии, имеющие положительную эффективность в одном эксперименте, имеют положительную эффективность и в другом эксперименте. То же верно для стратегий с отрицательной эффективностью. Эта закономерность имеет для каждой пары экспериментов, условия которых отличаются лишь степенью централизации: 2 и 8; 3 и 9, 4 и 10, 5 и 11, 6 и 12.

Четвертая закономерность – это то, что если коррупция бездействия сочетается с некомпетентностью сверхдействия (эксперименты 1, 3, 5, 7, 9, 11), то большинство стратегий имеет положительную эффективность, если же коррупция бездействия сочетается с некомпетентностью бездействия, то большинство стратегий имеет отрицательную эффективность.

Таким образом, сделать универсальные выводы относительно оптимальности стратегий на основании полученных экспериментов не представляется возможным. Речь идет скорее о том, что удалось выделить класс ситуаций, когда большинство стратегий имеют положительную эффективность, в противоположность ситуациям, когда почти все стратегии имеют отрицательную эффективность. Другими словами, выделить ситуации, в которых меры по борьбе с некомпетентностью и коррупцией, скорее всего, будут иметь положительные последствия. Но даже в этих ситуациях существует опасность выбрать неверную стратегию и получить отрицательную эффективность.

Литература

1. *Монахов Д.Н., Прончев Г. Б.* От цифры к цифровому обществу // Вопросы политологии. 2020. Т. 10, № 6(58). С. 1763-1771. DOI: 10.35775/PSI.2020.58.6.008 (анг. пер. Monakhov D.N., Pronchev G.B. From a digit to the digital society // Political Science Issues. 2020. V. 10, N 3(42-44). P. 277-284. DOI: 10.35775/PSI.2020.42.3.002)

2. *Rapoport A.* Mathematical Models in the Social and Behavioral Sciences. New York: John Wiley&Sons, 1983. 507 p.
3. *Peter L.J., Hull R.* The Peter Principle: Why Things Always Go Wrong. N.Y.: William Morrow and Company Inc., 1969. 179 p.
4. *Мухайлов А.П.* Модель коррумпированных властных иерархий // Математическое моделирование. 1999. Т. 11, № 1. С. 3-17.
5. *Rose-Ackerman S.* The political economy of corruption // Corruption and the global economy. 1997. V. 31, N. 60.
6. *Ackerman, S.R.* Corruption: A study in political economy. New York: Academic Pres. 1978.
7. *Tirole J.* Hierarchies and bureaucracies: On the role of collusion in organizations. JL Econ.&Org. 1986. V. 2, p.181.
8. *Вас М.* Corruption, supervision, and the structure of hierarchies // The Journal of Law, Economics, and Organization. 1996. V. 12, N. 2. P.277-298.
9. *Mauro P.* Corruption and growth. The quarterly journal of economics. 1995. V. 110. N. 3. P. 681-712.
10. *Bertrand M., Djankov S., Hanna R., Mullainathan S.* Does corruption produce unsafe drivers? National Bureau of Economic Research. N. w12274. 2006.
11. *Васин А.А., Картунова П.А., Уразов А.С.* Модели организации государственных инспекций и борьбы с коррупцией // Математическое моделирование. 2010. Т. 226 N. 4. С. 67-89.
12. *Зеток Д. А., Малинецкий Г.Г., Фаллер Д.С.* Модели организации государственных инспекций и борьбы с коррупцией // Математическое моделирование. 2010. Т. 226 N. 4. С. 67-89.
13. *Chkhartishvili A.G., Gubanov D.A., Novikov D.A.* Social Networks: Models of information influence, control and confrontation. Cham, Switzerland: Springer International Publishing. 2019. DOI: 10.1007/978-3-030-05429-8.
14. *Gubanov D., Petrov I.* Multidimensional Model of Opinion Polarization in Social Networks. Twelfth International Conference "Management of large-scale system development". IEEE, 2019. DOI: 10.1109/MLSD.2019.8910967.
15. *Chartishvili A.G., Kozitsin I.V., Goiko V.L., Saifulin E.R.* On an Approach to Measure the Level of Polarization of Individuals' Opinions. Twelfth International Conference "Management of large-scale system development". IEEE. 2019. DOI: 10.1109/MLSD.2019.8911015.
16. *Kozitsin I.V., Marchenko A.M., Goiko V.L., Palkin R.V.* Symmetric Convex Mechanism of Opinion Formation Predicts Directions of Users' Opinions Trajectories. Twelfth International Conference

- "Management of large-scale system development". IEEE. 2019. DOI: 10.1109/MLSD.2019.8911064.
17. *Mikhailov A.P., Petrov A.P., Proncheva O.G.* A Model of Information Warfare in a Society with a Piecewise Constant Function of the Destabilizing Impact // *Mathematical Models and Computer Simulations*. 2019. V. 11, N. 2. P. 190-197. DOI: 10.1134/S2070048219020108
 18. *Mikhailov A.P., Petrov A.P., Pronchev G.B. and Proncheva O.G.* Modeling a Decrease in Public Attention to a Past One-Time Political Event. *Doklady Mathematics*. 2018. V. 97. N. 3. P. 247-249. ISSN 1064-5624. doi: 10.1134/S106456218030158
 19. *Mikhailov A. P., Petrov A. P., Proncheva O. G.* Modeling the effect of political polarization on the outcome of propaganda battle // *Computational mathematics and information technologies*. 2017. N 1. P. 65-81. doi:10.23947/2587-8999-2017-1-1-65-81
 20. *Boldyreva A., Sobolevskiy O., Alexandrov M., Danilova V.* Creating collections of descriptors of events and processes based on Internet queries // *14-th Mexican Intern. Conf. on Artif. Intell.* 2016. Springer Cham, LNAI. 2016. V. 10061 (chapter 26). P. 303-314. https://doi.org/10.1007/978-3-319-62434-1_26. 10.1134/S1064562418030158
 21. *Boldyreva A., Alexandrov M., Koshulko O., Sobolevskiy O.* Queries to Internet as a tool for analysis of the regional police work and forecast of the crimes in regions // *14-th Mexican Intern. Conf. on Artif. Intell.* 2016. Springer Cham, LNAI. V. 10061 (chapter 25). P. 290-302.
 22. *Akhtyamova L., Alexandrov M., Cardiff J., Koshulko O.* Opinion Mining on Small and Noisy Samples of Health-related Texts // *Advances in Intelligent Systems and Computing III*. 2019. Springer. AISC. V. 871. P. 1-12.
 23. *Akhtyamova L., Cardiff J.* LM-Based Word Embeddings Improve Biomedical Named Entity Recognition: A Detailed Analysis // *Bioinformatics and Biomedical Engineering. Lecture Notes in Computer Science*. 2020. V. 12108. Springer, Cham. DOI: 10.1007/978-3-030-45385-5_56.

МОДЕЛИРОВАНИЕ МИГРАЦИИ ТЯЖЕЛЫХ МЕТАЛЛОВ В ПОЧВЕ ОТ НАЗЕМНОГО ИСТОЧНИКА¹

Муратова Г.В., Минкина Т.М., Тимофеев А.Н.

Южный федеральный университет, г. Ростов-на-Дону

Аннотация

Данное исследование посвящено моделированию миграции тяжелых металлов (ТМ) в почве от наземного источника с учетом процессов сорбции и десорбции. Построенная модель реализована с использованием пакетов pFlexPDE, ANSYS fluent. Проведены численные эксперименты для исследования процессов миграции ТМ в почве в районе Новочеркасской ГРЭС на основе данных наблюдений за почвой прилегающих к электростанции территорий.

Актуальность темы исследования

Прогноз распространения загрязнений в почве является важной задачей для охраны окружающей среды и развития всех сельскохозяйственных видов деятельности. Отдельной проблемой является загрязнение почвы тяжелыми металлами (ТМ), занимающими второе место по степени опасности, уступаая пестицидам и значительно опережая загрязнениями двуокисью углерода и серы. Несовершенство систем очистки в производстве приводят к загрязнению почвы, что является серьезной опасностью для сельского хозяйства и, в целом, для здоровья людей.

Точность оценки влияния различных факторов на загрязнения почвы ТМ напрямую зависит от используемой математической модели. Современные модели оценки загрязненности почвы включают в себя, как правило, уравнения движения газа или жидкости и массопереноса.

Математические модели загрязнения, использующие уравнение конвекции диффузии, позволяют изучить влияние некоторых основных характеристик почв (например, пористости), однако, они не учитывают характер движения жидкости в почве и в атмосфере. Для решения этой проблемы предлагается применение уравнений Навье-Стокса.

¹Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 19-05-50097

Математическая постановка задачи

Перенос примеси в атмосфере происходит за счет ветра, диффузии и гравитационного оседания, в почве – диффузии и движения влаги. Прочность образуемых соединений определяется через процессы сорбции ТМ гранулами почвы и десорбции. Общая схема показана на рисунке 1.

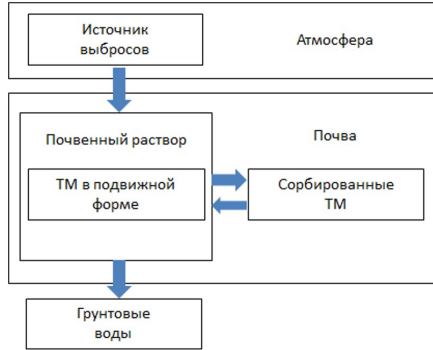


Рис. 1. Общая схема моделируемого процесса

Для описания процесса переноса ТМ была предложена модель [1] на основе уравнений неразрывности, Навье-Стокса, переноса кинетической энергии, ее диссипации и уравнения диффузии.

Движение жидкости и газа:

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0, \tag{1}$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t}(\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_i u_j) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \\ & + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \right) \right) + \frac{\partial}{\partial x_j}(-\rho \bar{u}'_i u'_j), \end{aligned} \tag{2}$$

$$-\rho \bar{u}'_i u'_j = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \left(\rho k + \mu_t \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \right) \delta_{ij}, \tag{3}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho k u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right) + G_k + G_b - \rho \varepsilon + S_k, \tag{4}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho\varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho\varepsilon u_i) &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right) + \\ &+ C_1 \frac{\varepsilon}{k} (G_k + C_3 G_b) - C_2 \rho \frac{\varepsilon^2}{k} + S_\varepsilon, \end{aligned} \quad (5)$$

Перенос вещества в атмосфере:

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(u_x c_i) + \frac{\partial}{\partial y}((u_y - u_g) c_i) + \frac{\partial}{\partial z}(u_z c_i) - \\ - \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial c_i}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial c_i}{\partial y} \right) - \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial c_i}{\partial z} \right) = f_i, \end{aligned} \quad (6)$$

Перенос вещества в почве

$$(\alpha - \gamma) \frac{\partial \tilde{c}_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\tilde{u}_j \tilde{c}_i) - \frac{\partial}{\partial x_j} \left(D_j \frac{\partial \tilde{c}_i}{\partial x_j} \right) = c_i(x, y_0, z, t), \quad (7)$$

$$\begin{aligned} \mu_t = \rho C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon}, \sigma_k = 1, \sigma_\varepsilon = 1.3, C_\mu = 0.09, C_1 = 1.44, C_2 = 1.92 \\ G_2 = -\rho \tilde{u}_i \tilde{u}_j \frac{\partial u_j}{\partial x_i}, G_b = -g \frac{\mu_t}{\rho Pr} \frac{\partial \rho}{\partial y}, C_3 = \tanh \left| \frac{v}{w} \right|, \end{aligned} \quad (8)$$

где u — вектор скорости потока воздуха, ρ — плотность среды, p — давление, μ — динамическая вязкость, $\rho \tilde{u}_i \tilde{u}_j$ — тензор турбулентных напряжений, μ_t — турбулентная вязкость. k — турбулентная кинетическая энергия, ε — скорость диссипации. S_k и S_ε задают свойства источника потока и определяются начальными условиями задачи. C_1 , C_2 , C_μ — эмпирические константы, σ_k и σ_ε — числа Прандтля для k и ε соответственно.

G_k описывает производство кинетической энергии, G_b — производство кинетической энергии, вызванное плавучестью, C_3 — влияние плавучести на ε . Pr — турбулентное число Прандтля (0.85), v — составляющая u , параллельная вектору ускорения свободного падения, w — перпендикулярная ему. u_g — скорость гравитационного оседания ТМ. α и γ — эмпирические константы скорости сорбции и десорбции соответственно; \tilde{c}_i — концентрация i -го ТМ в почве, \tilde{u} — вектор скорости движения влаги в почве, D — коэффициент диффузии в почве, $c_i(x, y_0, z, t)$ — функция источника поступления i -го ТМ в почву, определяемая как значение концентрации вещества на нижней границе атмосферы y_0 , K_x , K_z , и K_y — коэффициенты горизонтальной и вертикальной диффузии в атмосфере [2, 3].

Численные эксперименты

На основе построенной модели были проведены численные эксперименты. В качестве объекта исследования выбрана окрестность Новочеркасской

ГРЭС – крупнейшего регионального источника выбросов ТМ в атмосферу, доля загрязнения от которого составляет около 70% всех выбросов Ростовской области [4].

Информация об объемах тяжелых металлов в почве предоставлена кафедрой почвоведения и оценки земельных ресурсов Южного Федерального университета [5]. Данные представляют собой значение концентрации с на глубине $y = -0,2$ м за промежуток 2000–2018 года для цинка, свинца, меди, хрома, никеля, марганца и кадмия на нескольких площадках в окрестности Новочеркасской ГРЭС (рис.2).

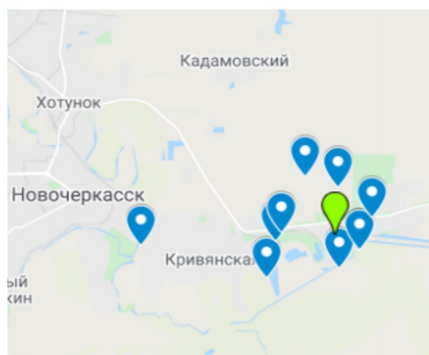


Рис. 2. Размещение площадок и НчГРЭС

Численное решение задачи реализовано при помощи пакета прикладных программ ANSYS Fluent для каждого направления ветра и каждого типа загрязняющего вещества. Постобработка результатов производилась на языке Python v.3.6.9 с применением библиотек Scipy и Numpy.

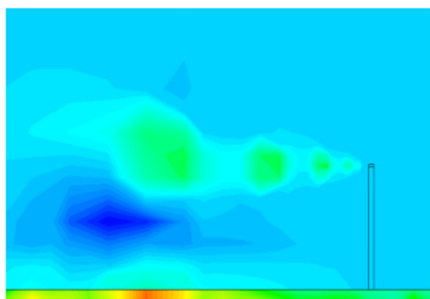


Рис. 3. Пример результатов расчета концентрации хрома для западного направления ветра за 2012 год (проекция YZ)

Изучение валовой концентрации хрома в почве за период с 2008 по 2014 года показывает соответствие поведения построенной математической модели при увеличении выбросов (наращение производственной мощности) и их уменьшении (модификация золоулавливающих установок).



Рис. 4. Моделирование валового содержания хрома за 2008-2014г. на одной из площадок

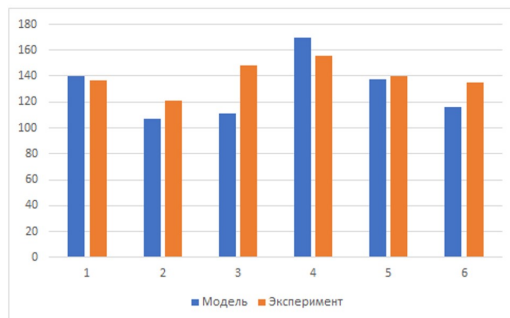


Рис. 5. Распределение значений смоделированной и экспериментальной концентрации хрома между площадками за 2008 год

Результаты численного моделирования согласуются с данными экспериментов. Результаты вычислений корректно отображают динамику изменения концентрации ТМ. Построенная математическая модель может применяться для анализа текущей ситуации и прогнозирования динамики миграции ТМ в почве от наземного источника эмиссии поллютантов.

Литература

1. Тимофеев А.Н., Муратова Г.В., Минкина Т.М. Построение математической модели миграции тяжелых металлов в почве от наземного источника // Сборник материалов XXVIII научной конференции "Современные информационные технологии: тенденции и перспективы развития". Ростов-на-Дону: изд-во ЮФУ, 2021. С. 324-329.
2. Муратова Г.В., Глушанин М.В. Исследование процессов переноса, диффузии и трансформации радиоактивных примесей, поступающих в атмосферу при авариях на объектах энергетики // Вычислительные технологии. 2009. №14. С. 85-97.
3. Самарская Е.А., Сузан Д.В., Тишкин В.Ф. Построение математической модели распространения загрязнении в атмосфере // Математическое моделирование. 1997. №11. С. 59-71.
4. Чуб М.Р. Технический отчет по инвентаризации выбросов загрязняющих веществ в атмосферу для филиала ОАО «ОГК-2» Новочеркасская ГРЭС, г. Новочеркасск Ростовской области, пос. Донской. Ростов-на-Дону: ООО «Дон-Инк», 2013. 224 с.
5. Тимофеев А.Н., Муратова Г.В., Минкина Т.М. Моделирование миграции тяжелых металлов в почве от наземного источника в окрестностях Новочеркасской ГРЭС // Инженерный вестник Дона. 2021, №8. URL:ivdon.ru/ru/magazine/archive/n8y2021/7145

ПЛАВЛЕНИЕ САПФИРА В УДАРНОЙ ВОЛНЕ¹

Острик А.В., Николаев Д.Н.

Институт проблем химической физики РАН, г. Черноголовка

Введение

Плавление, являясь фазовым переходом первого рода, существенно влияет на свойства вещества, некоторые характеристики (плотность, энтропия, электропроводность, прозрачность) которых претерпевают скачок на кривой плавления. Необходимость в информации о плавлении при высоких давлениях возникает в физике ударных волн (УВ), физике твердого тела, геофизике, астрофизике, а также во многих прикладных областях инженерной науки. В частности, знание кривых плавления требуется для лучшего понимания структуры планет и построения их тепловых моделей [1].

Проблеме плавления кристаллов при сжатии посвящено большое количество работ. Для определения кривых плавления вещества под давлением используются в основном следующие методы:

- оптическое, рентгеновское или рамановское обнаружение плавления при статическом сжатии в алмазной наковальне (ячейке высокого давления);
- наблюдение факта плавления, вызванного УВ, в динамических экспериментах (изменения наклона ударной адиабаты и (или) зависимости температуры ударного сжатия от давления за фронтом УВ);
- построение многофазных уравнений состояния (УРС) с выделением границ агрегатных состояния, в том числе, между твердой и жидкой фазами;
- расчеты *ab initio* и методом молекулярной динамики.

Для некоторых металлов, например, меди, согласие между расчетными и экспериментальными данными оказывается достаточно хорошим [2, 3], но для других переходных металлов (в частности, молибдена) единого мнения по интерпретации полученных данных [4, 5, 6] пока не существует.

По ряду причин экспериментальные исследования по плавлению были в основном сосредоточены на меди, железе и некоторых других переходных металлах, охватывая давления более 10 ГПа и температуры выше 1000 К. Поэтому остались недостаточно исследованными даже при сравнительно низких давлениях кривые плавления не менее интересных для теории и

¹Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (соглашение № 21-72-20023)

практики металлов, например, таких как магний, марганец, золото, серебро, цинк, кадмий, алюминий, индий и свинец.

Важным оконным материалом, используемым в динамических экспериментах с высокими давлениями и температурами, является сапфир (Al_2O_3). Это жесткий и прозрачный диэлектрик, из которого изготавливается ячейка для размещения и многократного ударного сжатия в ней жидкого водорода, о металлизации которого судят по повышению его электропроводности [7], [8]. Если же под давлением электропроводящей оказывается сама ячейка, то вывод о наступлении металлизации водорода оказывается ложным. Поэтому весьма важен вопрос: сохраняет ли оконный материал сапфир свои свойства при высоких давлениях и температурах, особенно прозрачность и низкую электропроводность. Электропроводность, конечно, чувствительна к состоянию вещества, к его структуре. В условиях динамических экспериментов зачастую трудно определить это состояние. Например, сложно узнать, находится ли сапфир в твердом или жидком состоянии, хотя хорошо известно, что в сильных УВ вещество плавится. В то же время данных о кривой плавления сапфира при высоких давлениях явно недостаточно.

В работе предлагается метод расчета кривых плавления кристаллических тел на основе теории теплоемкости Дебая (в случае металлов также учитывается вклад в теплоемкость электронной подсистемы) и критерия плавления Линдемана. В качестве основных экспериментальных данных используются ударные адиабаты (УА), определяемые в динамических экспериментах, и теплофизические характеристики вещества при нормальных условиях. Математически задача сводится к решению задачи Коши для системы обыкновенных дифференциальных уравнений. Система решается численно методом Рунге-Кутты.

Как уже отмечалось, одним из направлений изучения плавления являются динамические эксперименты [9], в которых высокие давления создаются в течение короткого промежутка времени в результате детонации взрывчатых веществ. Легкогазовая пушка использовалась для изучения железа [10], но её возможностей едва хватает для наблюдения ударного плавления тугоплавких оксидов [11]. В дальнейшем для изучения оксидов были использованы лазерные УВ [12], [13], [14], [15]. Для регистрации момента плавления ударно сжатого вещества используются следующие методы:

- измерением для образцов различной кристаллографической ориентации ударных адиабат (УА), разница у которых при плавлении пропадает [15];
- по дифракционной картине при облучении ударно нагружаемых кристаллов рентгеновским излучением [16];
- посредством прямого наблюдения температуры за фронтом УВ [12], [13], [14].

В этой работе для генерации УВ использовались взрывные куммулятивные генераторы на основе маховского отражения УВ от оси симметрии, генерирующие давления в диапазоне между давлениями газовой пушки и лазерной УВ. Температура за фронтом УВ регистрировалась оптической пирометрией. Экспериментальные результаты, полученные при плавлении сапфира в результате ударного сжатия, сравнивают с температурой за УВ и кривой плавления, рассчитываемыми по предлагаемому в статье методу.

I Построение уравнений состояния и расчет кривых плавления в области сжатия

При построении УРС вещества традиционно используются данные ударно-волновых экспериментов в сочетании с данными о его теплофизических свойствах, в частности, зависимости удельной теплоемкости от плотности и температуры. Уравнение состояния строится в виде:

$$E = E(\rho, T) = E_c(\rho) + E_T(\rho, T) = E_c(\rho) + \int_0^T C_V(\rho, T) dT, \quad (1)$$

$$P = P(\rho, T) = P_c(\rho) + \Gamma(\rho, T)\rho E_T = \rho^2 \frac{dE_c}{d\rho} + \Gamma(\rho, T) \int_0^T C_V(\rho, T) dT, \quad (2)$$

где ρ – плотность вещества; E, E_c, E_T – полная, холодная и тепловая удельные энергии; P, P_c, P_T – полное, холодное и тепловое давления; $\Gamma = \Gamma(\rho, T)$ – функция Грюнайзена; C_V – удельная теплоемкость.

В УРС вида (1), (2) входят две неизвестные функции $E_c(\rho)$ и $\Gamma(\rho, T)$ (зависимость удельной теплоемкости от плотности и температуры считается известной), которые должны быть построены из данных ударно-волновых экспериментов с учетом основного термодинамического тождества:

$$\left(\frac{\partial E}{\partial(1/\rho)} \right)_T = T \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_\rho - P. \quad (3)$$

Подставляя (1), (2) в (3), получаем уравнение для определения коэффициента Грюнайзена

$$\left(\frac{\partial T E_T \Gamma}{\partial T} \right)_\rho - 2 \frac{T E_T \Gamma}{T} = \left(\frac{\partial E_T}{\rho \partial(1/\rho)} \right)_T. \quad (4)$$

Интегрируя (4) с начальным условием (учли, что $T \rightarrow 0$ и $C_V \rightarrow 0$)

$$\frac{E_T \Gamma}{T} \Big|_{T=0} = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{\partial C_v}{\partial T} \Big|_{T=0} \frac{T^2 \Gamma}{2 T} = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{\partial C_v}{\partial T} \Big|_{T=0} \frac{\Gamma T}{2} = 0,$$

получаем

$$\Gamma(\rho, T) = \frac{T}{E_T(\rho, T)} \int_0^T \left(\frac{\partial E_T(\rho, T)}{\rho \partial(1/\rho)} \right)_T \frac{dT}{T^2}, \quad (5)$$

где $v = 1/\rho$, $\Gamma_0(\rho)$ – функция Грюнайзена при нормальной температуре (здесь и далее индексом ноль отмечаются величины, относящиеся к нормальным условиям).

Для Дебаевского приближения, когда $E_T(\rho, T) = T e_T(\theta_D(\rho)/T)$ и $C_v(\rho, T) = C_v(\theta_D(\rho)/T)$ из (5) получаем, интегрируя по частям

$$\Gamma(\rho) = \Gamma_{00}(\rho) = - \frac{d \ln \theta_D(\rho)}{d \ln(1/\rho)}, \quad (6)$$

где $\Gamma_{00}(\rho)$ – функция Грюнайзена при абсолютном нуле.

Таким образом, в соответствии с (6) в Дебаевском приближении функция Грюнайзена не зависит от температуры, а само соотношение (6) обеспечивает выполнение условия термодинамической совместности.

В более общем случае, с учетом вклада в теплоемкость электронной компоненты удельная внутренняя энергия определяется соотношением

$$E_T(T) = T e_T \left(\frac{\theta_D(\rho)}{T} \right) + \frac{C_e T^2}{2} \left(\frac{\rho_0}{\rho} \right)^{\gamma_e}, \quad (7)$$

где ρ_0 – плотность вещества при нормальных условиях; C_e – коэффициент электронной теплоемкости; γ_e – электронный аналог коэффициента Грюнайзена. Из (5) - (7) получаем

$$\Gamma(\rho, T) = \frac{T}{E_T(\rho, T)} \left[\Gamma_{00}(\rho) e_T \left(\frac{\theta_D(\rho)}{T} \right) + \gamma_e \frac{C_e T}{2} \left(\frac{\rho_0}{\rho} \right)^{\gamma_e} \right]. \quad (8)$$

Согласно (8) при учете вклада электронной теплоемкости функция Грюнайзена зависит и от температуры и задается функциями плотности $\theta_D(\rho)$, $\Gamma_{00}(\rho)$, определяемыми далее в табличном виде.

Для расчета функция холодной энергии $E_c = E_c(\rho)$ используются данные по ударной сжимаемости $P_H = P_H(\rho)$. Из соотношения Гюгонио на фронте УВ имеем: :

$$E - E_0 = \frac{1}{2} (P_H(\rho) + P_0) \left(\frac{1}{\rho_0} - \frac{1}{\rho} \right),$$

откуда, используя (1), получаем

$$E_T(\rho, T_H(\rho)) = \psi(\rho) - E_c^*, \quad (9)$$

$$\psi(\rho) = (P_H(\rho) + P_0)(1/\rho_0 - 1/\rho)/2 + E_{T0}, \quad E_{T0} = E_T(\rho_0, T_0), \quad E_c^* = E_c(\rho) - E_c(\rho_0),$$

где $T_H(\rho)$ – температура на ударной адиабате.

Отметим, что если экспериментальная УА задана линейной зависимостью $D = \alpha + \beta U$ между волновой и массовой скоростями (D – волновая скорость; U – массовая скорость, α, β – экспериментально определяемые коэффициенты), то ударная сжимаемость рассчитывается по известному соотношению

$$P_H(\rho) = P_0 + \rho_0 DU = P_0 + \rho_0 \frac{\alpha^2(1 - \rho_0/\rho)}{[1 - \beta(1 - \rho_0/\rho)]^2}.$$

Поскольку на УА уравнения состояния также выполняются, то

$$-\frac{dE_c^*}{d(1/\rho)} + \Gamma(\rho, T_H(\rho))\rho E_T(\rho, T_H(\rho)) = P_H(\rho). \quad (10)$$

Для поликристаллического теле функция $\Gamma_{00}(\rho)$ рассчитывается из известного соотношения ($t = 0$ – теория Ландау – Слэтера; $t = 1$ – теория Дуглейла – Макдональда; $t = 2$ – теория свободного объема) ($\gamma = 2t/3$)

$$\Gamma_{00}(\rho) = -\frac{2-t}{3} - \frac{1}{2\rho} \frac{d^2}{d(1/\rho)^2} (\rho^{-\gamma} P_c(\rho)), \quad P_c(\rho) = -\frac{dE_c^*}{d(1/\rho)}. \quad (11)$$

Входящий в (11) параметр t может быть определен из условия касания третьего порядка УА и нулевой энтропии (в случае $D = \alpha + \beta U$)

$$\Gamma_{00}(\rho_{00}) = 2\beta - \frac{2+t}{3}.$$

Из (8)-(11) получаем систему пяти обыкновенных дифференциальных уравнений для определения неизвестных функций плотности

$$\begin{cases} \frac{dE_c^*}{d\rho} = Y_1, & \frac{dY_1}{d\rho} = Y_2, \\ \frac{dY_2}{d\rho} = \frac{2}{\rho^2} \left(\frac{t-7}{3} + \Gamma_{00}^f(\rho) \right) (\rho Y_2 + (2-\gamma)Y_1) + (3-\gamma)(2-\gamma) \frac{Y_1}{\rho^2}, \\ \frac{dT_H}{d\rho} = \frac{d\psi/d\rho - Y_1 - (\partial E_T/\partial \rho)_T}{(\partial E_T/\partial T)_\rho}, & \frac{d\theta_D}{d\rho} = \frac{\theta_D}{\rho} \Gamma_{00}^f(\rho), \end{cases} \quad (12)$$

где Y_1, Y_2 – первая и вторая производные холодной энергии по плотности, а функция $\Gamma_{00}^f(\rho)$ рассчитывается по формуле (ϵ – отношение тепловых энергий электронов и атомов кристаллической решетки)

$$\Gamma_{00}^f(\rho) = \frac{P_H(\rho) - \rho^2 Y_1}{\rho(\psi(\rho) - E_c^*(\rho))} (1 - \epsilon) - \epsilon, \quad \epsilon = \frac{C_e T}{2e_T} \left(\frac{\rho_0}{\rho} \right)^{\gamma_e}$$

Начальные условия для системы уравнений (12) задаются при нормальной плотности $\rho = \rho_0$ (индексом ноль отмечаются величины при нормальных условиях):

$$E_c^*|_{\rho=\rho_0} = 0, \quad Y_1 \Big|_{\rho=\rho_0} = \frac{P_0}{\rho_0^2} - \frac{\Gamma_0 E_{T0}}{\rho_0}, \quad Y_2 \Big|_{\rho=\rho_0} = -\frac{dP_H}{\rho^2 d\rho} \Big|_{\rho=\rho_0} - \frac{2P_0}{\rho_0^3} - \frac{\Gamma_0 E_{T0}}{\rho_0^2} (\Gamma_0 - 2). \quad (13)$$

$$T_H \Big|_{\rho=\rho_0} = T_0, \quad \theta_D \Big|_{\rho=\rho_0} = \theta_{D0}, \quad (14)$$

Первое условие – очевидно из определения E_c^* . Второе условие следует из (10). Третье условие для второй производной может быть получено из условия касания ударной адиабаты и изэнтропы $(\partial P/\partial \rho)_{H0} = (\partial P/\partial \rho)_{S0}$. Четвертое и пятое условия – очевидны также.

Системы дифференциальных уравнений (12) с начальными условиями (13), (14) интегрируются численно методом Рунге-Кутты четвертого порядка точности с переменным шагом по плотности.

Как правило, адекватность построенных УРС в первую очередь обосновывается сравнением с данными динамических экспериментов по ударной сжимаемости. В предлагаемом подходе ударная сжимаемость воспроизводится с любой разумной (с ошибкой не более погрешности экспериментальных данных) точностью, т.к. используется при построении УРС. Представляется целесообразным провести сравнение результатов, полученных по УРС, с экспериментальными данными по кривым плавления. Для расчета кривых плавления используется критерий плавления Линдемана. Суть критерия заключается в утверждении, что плавление наступает, когда отношение среднеквадратического отклонения к квадрату расстояния между соседними атомами достигает порогового значения [17]. Этот физически понятный критерий использовался в ряде работ для расчета кривых плавления многих металлов (см., например, [18], [19], [20]). Более общая математическая формулировка критерия Линдемана получается на основе классического подхода среднего потенциала поля [21].

$$T_m = const \times \rho^{-2/3} \theta_D^2, \quad (15)$$

где T_m – температура плавления.

Из (15) следует

$$T_m = T_{m0} \times (\rho_{m0}/\rho)^{2/3} \theta_D^2, \quad (16)$$

где T_{m0} – температура плавления при нормальном атмосферном давлении; ρ_{m0} – плотность вещества в твердом состоянии при T_{m0} и нормальном давлении.

Согласно (16) зависимость может быть рассчитана при известной функции $\theta_D = \theta_D(\rho)$ (в нашем случае определенной при построении УРС) и экспериментально измеренных значениях плотности ρ_{m0} [22] и температуры T_{m0} . В итоге, исходя из УРС $P = P(\rho, T)$ и входящей в предлагаемый

УРС зависимости $\theta_D = \theta_D(\rho)$ кривая плавления $T_m = T_m(P)$ строится в параметрическом виде, где в качестве параметра выступает плотность:

$$T_m = T_m(\rho), \quad P = P(\rho, T_m(\rho)). \quad (17)$$

II Экспериментальный метод исследования

Известны взрывные устройства [23], [24], [25], генерирующие высокие давления посредством нерегулярного маховского отражения конически сходящихся УВ. Эти устройства использовали режим одиночного отражения, при котором наблюдается быстрое падением давления за диском Маха. Более плавное затухание давления за диском Маха удается получить в устройстве [26], в котором реализуется двойное маховское отражение. В этом устройстве двойное маховское отражение формируется в слоистом цилиндрическом центральном теле "твердая оболочка – мягкий сердечник", но заряд и лайнер остаются коническими, как и в [23], [24], [25], что существенно затрудняет изготовление такого устройства.

В работе [27] было предложено полностью отказаться от конических деталей, динамически формируя коническую геометрию в первоначально цилиндрическом генераторе. В этом случае коническая детонационная волна генерируется последовательным инициированием основного заряда многоточечным распределителем детонации. На основе малого одноступенчатого генератора [27] (см. рис. 1) были разработаны и более мощные взрывные устройства.

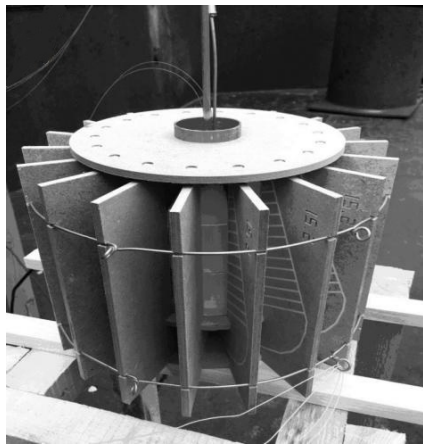


Рис. 1. Малый одноступенчатый генератор высокого давления.

Характеристики этих генераторов, использующих двойное маховское отражение, представлены в таблице 1. Отметим, что максимальное давление, полученное в сапфире при помощи двухступенчатой легкогазовой пушки, составило 340 ГПа [28], и это значение оказывается уже меньше, чем для малого одноступенчатого генератора. Приведенные в таблице величины давлений соответствуют их максимальным значениям, но посредством варьирования геометрии распределителя детонации генерируемые давления возможно уменьшать в некоторых пределах (порядка двух раз).

Таким образом, разработанный набор взрывных генераторов с двойным маховским отражением позволяет проводить динамические эксперименты в

Таблица 1.

Характеристики генераторов высоких давлений

Характеристики генератора	Малый одноступенчатый	Большой одноступенчатый	Большой двуступенчатый
Диаметр, мм	150	216	216
Длина, мм	150	250	250
Масса ВВ, кг	3,9	12,5	12,5
Диаметр УВ, мм	20-26	20	10
P_{max} в SiO_2 , ГПа	295	520	1050
P_{max} в Al_2O_3 , ГПа	395	680	1320
P_{max} в Fe , ГПа	490	860	1700

широком диапазоне изменения давлений: от 2,5 Мбар до 17 Мбар.

Измерение ударной сжимаемости производилось методом отражения [29]. Кристаллический α -кварц (х-срез) был выбран в качестве вещества – эталона [30]. Оптическая регистрация температуры фронта УВ выполнялась многоканальным пирометром с оптическим вводом излучения. Калибровка пирометра делалась по вольфрамовой ленточной лампе [31]. Полоса регистрации пирометра 500 МГц достаточна для измерения температуры на стационарных участках записей длиной 70-250 нс.

III Результаты исследования

Сапфир (Al_2O_3) является молекулярным кристаллом и диэлектриком с запрещенной зоной шириной 4,8 эВ. Соответственно, у него отсутствует электронная часть теплоемкости, и в расчетах полагалось $C_e = 0$.

Экспериментальная информация об УА сапфира, требующаяся для построения УРС, бралась из работ [28], [32], [33] и данных [34], взятых из работы [35]. Наши экспериментальные данные представлены на рис. 2 вместе с данными [28], [32], [33], [34] и результатами расчетов [36], [37], а также по УРС SESAME – 7411 [37]. Видно, что полученные нами данные в области значений массовой скорости 11 – 14 км/с подтверждают «жесткий» ход УА, заданный точками [32], [34]. Точки в области низких значений массовой скорости $U < 10$ км/с хорошо согласуются с данными [28].

Таким образом, во всей представляющей интерес области хорошо работает аппроксимация Керли (Kerley) [37] ($[D] = [U] = \text{км/с}$)

$$D = 7,673 + 1,23U, \quad (18)$$

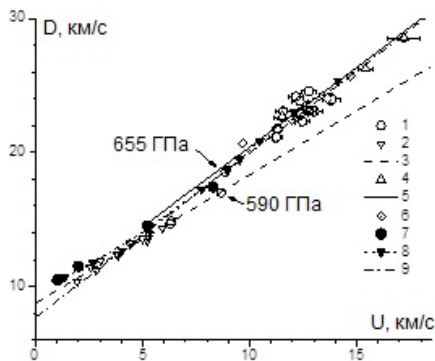


Рис. 2. Ударная адиабата сапфира: 1 – эта работа; 2 – [28]; 3 – линейная аппроксимация из [28]; 4 – [32]; 5 – SESAME-7411 из [37]; 6 – [34], [35]; 7 – [33]; 8 – QMD-вычисления [36]; 9 – линейная аппроксимация из [37].

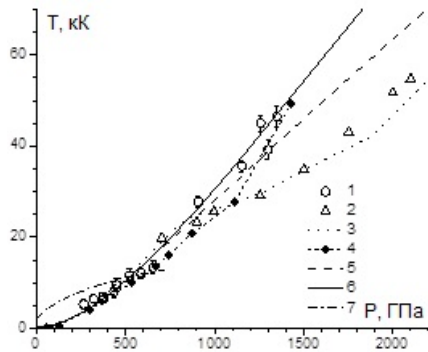


Рис. 3. Температура ударно сжатого сапфира в зависимости от давления. Эксперимент: 1 – эта работа, 2 – [38]. Расчеты: 3 – [37]; 4 – [36]; 5 – SESAME-7411 из [37]; 6 – по УРС, эта работа; 7 – кривая плавления, эта работа.

но при невысоких давлениях экспериментальные результаты лучше описывают данные Эрскине (Erskine) [28] с аппроксимацией

$$D = 8,74 + U. \quad (19)$$

Для изучения влияния точности задания УА на кривую плавления расчеты проводились по УА (18) и по комбинации из (18) и (19):

$$D = \begin{cases} 8,74 + U, & U \leq 4,639 \\ 7,673 + 1,23 \times U, & U > 4,639. \end{cases} \quad (20)$$

Полученные в работе экспериментальные данные по температурам ударного сжатия сапфира представлены на рис. 3. В [32], [38] экспериментально было показано, что отражательная способность фронта УВ в сапфире может достигать значительных (до $R = 0,3 - 0,4$) величин, что соответствует излучательной способности $\epsilon = 0,6 - 0,7$ и приводит к заметной разнице истинной и яркостной температур. Данные по коэффициентам отражения [32], [36], [38] использовались при обработке наших температур для точек с давлением выше 800 ГПа (отражательная способность ниже 800 ГПа ничтожно мала для того, чтобы её учитывать при пересчете температуры). Отметим, что коэффициент отражения R определялся для лазерного излучения на длине волны 532 нм и это значение отличается от средней длины волны в наших экспериментах (900 нм), внося в температуру при её пересчете некоторую

погрешность, однако это не влияет на температуры, измеряемые в области плавления (в этой области $P < 800$ ГПа и в пересчете нет необходимости).

В [38] данные по температуре приведены уже с учетом отражательной способности на фронте УВ. Несмотря на это, при давлении выше 900 ГПа полученные нами яркостные температуры близки к данным [38]. Если учитывать отражательную способность, то значения температур увеличиваются и хорошо соответствуют результатам, полученным по нашей модели EOS. Также улучшается согласие с расчетом QMD (методом квантовой молекулярной динамики) [36]. Отметим, что в области плавления в УВ экспериментальные данные по температуре, полученные в этой работе, близки к кривой плавления (кривая 7 на рис. 3), рассчитанной по предлагаемому методу.

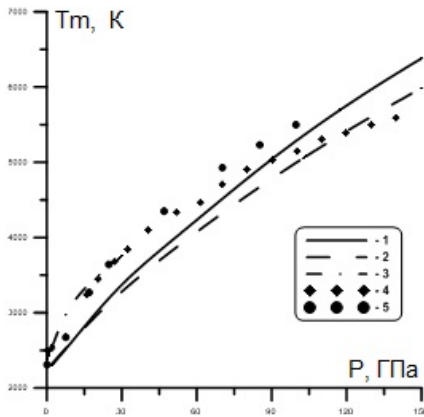


Рис. 4. Кривые плавления сапфира при умеренных давлениях. 1 – эта работа при билинейной аппроксимации (20); 2 – эта работа при линейной аппроксимации (18); 3 – DAC [39]; 4 – [40], 5 – MD [41].

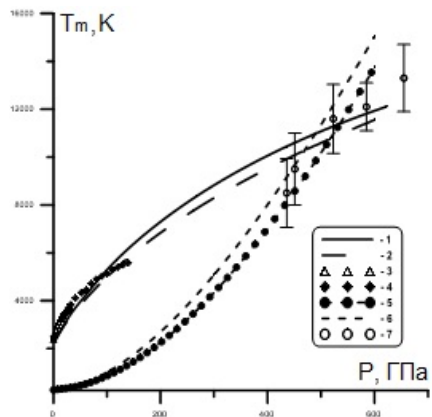


Рис. 5. Плавление сапфира при высоких давлениях. Кривые плавления: 1 – эта работа, билинейная аппроксимация (20); 2 – эта работа линейная аппроксимация (18); 3 – DAC [39]; 4 – [40]. Температура ударного сжатия, эта работа: 5 – билинейная аппроксимация (20); 6 – линейная аппроксимация ((18); 7 – эксперимент.

На рис. 4, 5 представлены расчетные кривые плавления сапфира и их сравнение с данными работ других авторов. Дополнительно на рис. 5 показаны зависимости температуры ударно сжатого сапфира от давления, рассчитанные по предложенным в работе УРС без учета плавления, и полученные нами три экспериментальные точки этой зависимости в области плавления в УВ. При невысоких давлениях (рис. 4) наблюдается удовлетворительное соответствие данных. Однако сильно отличаются наклоны кривых в начальной

точке (при $P = P_0$), что, скорее всего, обусловлено различием в исходных данных для нормальных условий. При давлениях более 150 ГПа экспериментальные данные о кривой плавления сапфира отсутствуют. Результаты наших расчетов дают точку пересечения кривой плавления с кривой ударного сжатия при давлении 500 ГПа и температуре 10000 К (см. рис. 5). Это точка пересечения соответствует плавлению сапфира в УВ и согласуется по давлению с данными работы [32], [36]. Также из рис. 5 видно, что в области плавления экспериментальные точки зависимости $T_H = T_H(P)$ лежат вблизи рассчитанной кривой плавления (в пределах ошибки измерений), что также свидетельствует о ее достоверности (при образовании из УВ двухфазной области жидкость-кристалл зависимость температуры ударного сжатия от давления $T_H(P)$ следует вдоль кривой плавления $T_m(P)$).

Выводы

1. Предложен новый феноменологический подход к построению УРС в области сжатия и расчету кривых плавления кристаллических тел при высоких давлениях и умеренных температурах, при котором в качестве основных экспериментальных данных используются УА, определяемые в динамических экспериментах, и теплофизические характеристики вещества при нормальных условиях.

2. Посредством сравнения с имеющимися расчетными и экспериментальными данными для кривых плавления и температур ударного сжатия в мегабарном диапазоне изменения давлений показана применимость предложенного подхода к построению УРС в области сжатия.

3. В результате систематических экспериментов с использованием маховских генераторов уточнена УА сапфира в ранее не исследованном диапазоне изменения давлений. С учетом этих уточнений проведены расчеты кривой плавления сапфира в области давлений, где данные практически отсутствуют ($P > 150$ ГПа). Получено, что в этой области рассчитанные кривые плавления и зависимости температуры ударного сжатия от давления дают точку пересечения, соответствующую известным параметрам плавления сапфира в УВ. В широком диапазоне давлений измерена яркостная температура сапфира за фронтом УВ. Показано, что излом на кривой Гюгиони соответствует расчетным и экспериментальным данным о начале плавления сапфира в УВ.

Литература

1. *Zharkov V. N.* 1986 Interior Structure of the Earth and Planets, Harwood, New York.
2. *Japel S., Schwager B., Boehler R. and Ross M.* 2005 Phys. Rev. Lett. 95 167801.
3. *Vocadlo L., Alfe D., Price G. D. and Gillan M. J.* 2004 J. Chem. Phys. 120 2872
4. *Errandonea D., Schwager B., Ditz R., Gessmann C., Boehler R. and Ross M.* 2001 Phys. Rev. B 63 132104.
5. *Errandonea D. J.* 2006 Phys. Chem. Solids 67 9–10 pp. 2017–2026.
6. *Belonoshko A. B., Burakovskiy L., Chen S. P., Johansson B., Mikhaylushkin A. S., Preston D. L., Simak S.I. and Swift D. C.* 2008 Phys. Rev. Lett. 100 135701.

7. *Ternovoi V Ya, Pyalling A A, Nikolaev D N and Kvitov S V* 2009 AIP Conf. Proc. 1195 915.
8. *Weir S T, Mitchell A C and Nellis W J* 1996 Phys.Rev.Lett 76 11 1860.
9. *Altshuler L. V., Trunin R. F., Urlin V. D., Fortov V. E. and Funtikov A. I.* 1999 UFN 169 3 pp 323-344.
10. *Ahrens T J, Tan H and Bass J. D* 1990 High Pressure Research 2 3 145.
11. *Fat'yanov V and Asimov P* . 2014 J. Phys.: Conf. Ser. 500 062003.
12. *Root S, Shulenburg L, Lemke R W, Dolan D H, Mattsson T R, and Desjarlais M P* Phys. Rev. Lett. 115 198501.
13. *McWilliams R S, Spaulding D K, Eggert J H et al* Science 2012 338 6112 1330.
14. *Hicks D G., Boehly T R, Eggert J H, Miller J E, Celliers P M and. Collins G W* 2006 Phys. Rev. Lett. 97 025502.
15. *Duwal S, McCoy C A, Weck P F, Kalita P, Hanshaw H L, Cochrane K., Ao T, and Root S* 2020 Phys. Rev B 102, 024105.
16. *Turneaure S J, Sharma S M and Gupta Y M V* 2018 Phys. Rev. Lett. 121 135701.
17. *Lawson A. C.* 2009 Philosophical Magazine 89 pp 1757-1770.
18. *Burakovsky L., Preston D. .L and Silbar R. R.* 2000 J. Appl. Phys. 88 pp 6294-6301.
19. *Errandonea D.* 2005 Physica B 357 pp 356-364.
20. *Arafin S., Singh R. N. and George A. K.* 2013 Physica B: Condensed Matter 419 pp 40-44.
21. *Wang Y., Ahuja R., and Johansson B.* 2001 Phys. Rev. B 65 014104.
22. *Mao H. .K., Bell P. M., Shaner J. W. and Steinberg D. J.* 1978 J. Appl. Phys. 49 pp 3276-3283.
23. *Ph. de Beaumont and Leygonie L. J.* 1970 Proc. Fifth Intern. Symposium on Detonation (Pasadena, CA, ACR-184 Office of Naval Research, Arlington, VA) p. 547.
24. *Glushak B., Zharkov A. and et al.* 1989 ZETP 96 1301.
25. *Derentowicz H.* 1989 J. App. Mech. Tech. Phys. 30 1 21.
26. *Zharkov A. and Kryukov B.* 2004 in: Physics of extreme states of matter, ed. V. Fortov et al. (Chernogolovka, IPCP RAS) p 2.
27. *Nikolaev D., Ternovoi V. and et al.* 2014 J. of Physics Conference Series 500 (14) 142026.
28. *Erskine D.* 1994 High-Press. Sci. Techn.-1993 ed. S. C. Schmidt et al. (AIP Press NY) pp 141-143.
29. *Zeldovich Y B and Raizer Y P* 2002 Physics of shock waves and high-temperature hydrodynamic phenomena (Dover publications Inc. Mineola New York).
30. *Knudson M D and Desjarlais M P* 2013 Phys. Rev. B 88 184107.
31. *Boslough M B and Ahrens T J* 1989 Rev. Sci. Inst. 60 3711.
32. *Hicks D. G., Celliers P. M., Collins G. W., Eggert J. H. and Moon S. J.* 2003 Phys.Rev. Lett. 91 035502.
33. *Pavlovskii M N* 1971 Sov. Phys. Solid State 12 1737.
34. *Sano T et al.* 2013 Bull. Am. Phys. Soc. 58 28
35. *Ozaki N., Nellis W. J. and et al.* 2016 Scientific Reports 6 26000.
36. *Liu H., Tse J. S. and Nellis W. J.* 2015 Scientific Reports 5(1) 12823.
37. *Kerley G. I.* 2009 Report on contract 949182 (Johns Hopkins University Applied Physics Laboratory, Laurel, MD).
38. *Miller J. E.* 2006 48th APS Meeting (Presentation is available at <http://www.lle.rochester.edu/pub/conferences/APS06/MillerAPS06.pdf>).
39. *Shen G and Lazor P* 1995 J. Gepophys. Res. 100 B9 17699.
40. *Wang Z, Mao H, Saxena S K* 2000 Journal of alloys and compounds 299 287.
41. *Belonoshko A* 1998 Phys Chem Min 25 138.

МОДЕЛЬ ВСПЫШЕК ДЛЯ ПОЛИВОЛЬТИННОГО ЖИЗНЕННОГО ЦИКЛА ВРЕДИТЕЛЯ¹

Переварюха А.Ю.

*Санкт-Петербургский Федеральный исследовательский центр
Российской академии наук, Санкт-Петербург*

Введение

Статья посвящена вычислительному моделированию популяционного процесса в условиях развития смежных поколений у насекомых-фитофагов, которые оказываются в различных условиях окружающей среды — типичная ситуация для Евразии и Северной Америки. Актуальную проблему составляет явление в динамике популяций, когда одно из нескольких в серии малочисленных поколений насекомых вредителей леса вдруг переходит к инвазионной вспышке численности. Цель исследования — разработка модели выживаемости взаимно продуцирующих поколений с разной регулировкой факторов смертности и на разной длительности интервалов времени онтогенеза. Для задачи становится необходимым оперерирование непрерывно-дискретным представлением времени из «склеенных» событиями непрерывных отрезков, где события рассчитываются вспогаемельными средствами.

I Сопряженная динамика развития поколений

Реальные ситуации развития поколений насекомых в бореальных лесах сложно описать даже уравнениями $\dot{N} = rf(N^2(t - \nu)) - F(N^k)$ с $F(N(t - h_1), \dots, (N(t - h_j)))$ [1]. В бореальных лесах с долгой зимой интерес представляет формализация темпа убыли ювенальных стадий. Длительность онтогенеза в поливольтинном случае может быть τ или \mathcal{T} . Подход к моделированию можно принципиально усовершенствовать, если разделить дискретное размножение и дальнейшую изменяющуюся по скорости убыль поколения. Меняя в сценарных экспериментах величины τ или \mathcal{T} можно оценивать изменения погодных условий, соответственно продолжительность зимовки, на динамику поколений разного уровня численности.

Нами развивается направление «гибридных» динамических систем. К такой динамике относят дискретно-непрерывные, импульсные, непрерывно-событийные представления динамических систем. Выделяют и непрерывные интервалы, и дискретные отсчеты — выделяемые предикативно по набору условий [2]. Условия могут быть фиксированными внешними параметрами, либо рассчитываться из уравнений модели. Тогда мы говорим о модели, включающей набор предикатов и реинициализацией массивов с $N_t(0)$.

¹Выполнено в СПб ФИЦ РАН по проекту РФФИ № 17-07-00125.

Подход с двумя компонентами времени естественный для цикла развития насекомых. Беспозвоночные отличаются выраженной стадийностью развития. У многих насекомых с полным циклом превращений северных широт поколения имеют различные условия развития, соответственно иные механизмы, контролирующие формирование итогового половозрелого поколения. Поколения находятся в долгом анабиозе до весны, либо развиваются в весенних условиях. Интервал времени между появлением половозрелых генераций $\neq const$. Учет численности опасных насекомых проводят по вредящей стадии — поражение наносит гусеницы старших возрастов. Фиксируется состояние поколения $N(\mathfrak{T})$ в момент \mathfrak{T} незавершенного цикла развития, сезонная численность \mathcal{N} , наиболее многочисленного повреждающего поколения [3]. В ситуации вспышек численности вредителей состояние популяции оценивается по размерам поражения леса и минимальные значения на графиках вспышек в литературе не означают малочисленность популяции [4].

II Базовая модель выживаемости поколений

На развивающееся весной поколение активно оказывает давление паразиты, избирательно атакующие ранние стадии развития. Действие паразитов становится эффективным при высокой плотности жертв, а в случае паразитической осы *Trichogramma evanescens* поражаются яйца кукурузного мотылька [5]. Будем описывать убыль численности поколения $N(0)$ до нового размножения на интервале времени, раздельно учитывая факторы смертности в базовой модели убыли:

$$\frac{dN}{dt} = -(\alpha N(0) + \beta)N(t), \quad t \in [0, \tau], \quad (I)$$

где α — компенсационный параметр убыли, β — коэффициент независимой от плотности смертности. Для весеннего поколения сильна зависимость от начальной численности $N(0) = \lambda N(\mathcal{T})$ при действии негативных факторов активности естественных врагов. Если проинтегрировать (I), то получим унимодальную зависимость:

$$\int_{N(0)}^{N(t)} \frac{dN}{-(\alpha(w(t))N(0) + \beta)N(t)} = \int_0^t dt, N(t) = \frac{N(0)}{\exp(t(\alpha(w(t))N(0) + \beta))}.$$

Мы существенно модифицируем модель с добавлением в (I) $\mathfrak{F}[w(t)]$ — функционального поправочного сомножителя. Так учтем, что на выживаемость оказывают условия темпы развития, необходимые для метаморфоза, перехода на следующую стадию онтогенеза:

$$\frac{dN}{dt} = -(\alpha\mathfrak{F}[w(t)]N(0) + \beta)N(t), \quad t \in [0, \tau]. \quad (1)$$

Темпы роста $w(t) = l(N^{-k}(t))$, $k \notin \mathbb{Z}$ отражаются на выживаемости поколения в благоприятных условиях и при меньшей продолжительности онтогенеза не столь критическим образом. Связь темпов развития $\mathfrak{F}[w(t)]$ разная для поколения с долгой зимовкой, потому выберем две формализации \mathfrak{F} .

III Формализация различных условий продолжительности развития

Выход из-под атак паразита сопровождается достижением некоторой стадии развития, связанной с физиологическими изменениями [6]. Метаморфозы могут происходить только после накопления достаточной биомассы $w(t_d)$, что показано нами ранее при моделировании онтогенеза осетровых рыб Каспия [7]. Обеспеченность пищевых потребностей отдельной особи в свою очередь зависит от $N(t)$ и возможно предшествующего $N(t - \mathfrak{h})$, что определяет динамику среднего размерного развития поколения. Обоснованной представляется идея описания скорости убыли поколения в зависимости от темпов роста. Для скорости роста $w(t)$ многих видов на всем периоде жизни известно балансовое уравнение:

$$\frac{dw}{dt} = \zeta \sqrt[3]{w(t)^2} - \sigma w(t), \quad w(0) = w_0$$

Уравнение удовлетворительно описывает рост ряда животных на асимптотике приближения к $w \rightarrow W_\infty$, но исключая период раннего онтогенеза для видов с метаморфозами. Для насекомых и рыб данное уравнение необходимо модифицировать, так как сильно действует влияние скученности особей, и стадия развития №I проходит при эндогенном питании. При увеличении плотности возникает аномальное распределение размерной структуры популяции в сторону преобладания особей с меньшими размерами.

IV Динамика первого поколения

Опишем динамику убыли численности поколения на интервале $t \in [0, \tau]$ объединенными в систему уравнениями:

$$\begin{cases} \frac{dN}{dt} = - \left(\alpha \sqrt{\frac{\widehat{w}}{w(t)}} N(0) + \beta \right) N(t), \\ \frac{dw}{dt} = \zeta \frac{w(t)^{2/3}}{\sqrt{N(t)}} - \sigma w(t). \end{cases} \quad (2)$$

Включение запаздывания в (5) из-за израсходования ресурсов в данном сегменте модели не актуально, так как темп пополнения ресурсов высок.

V Уравнения второго поколения

Атака паразитов, вызванная первичной численностью специфическое сезонное явление. Опишем выживаемость второго поколения $t \in [0, \mathcal{T}]$ следующей системой уравнений с оптимальным значением размерного развития \tilde{w} для зимующего поколения:

$$\begin{cases} \frac{dN}{dt} = - \left(\alpha \sqrt{(\tilde{w} - w(t))^2} N(t) + \beta \right) N(t - \mathfrak{h}), \\ \frac{dw}{dt} = \frac{Q}{\sqrt[3]{N^2 + \zeta}}. \end{cases} \quad (3)$$

В (6) $w(t)$ — отражает уровень размерного развития поколения, влияющий на увеличение пищевых потребностей; Q — параметр, учитывающий ограниченность количества доступных ресурсов; ζ — параметр, учитывающий ограничение темпов развития не зависящее от численности и отражающий уровень конкуренции за ресурсы [8]. α — коэффициент смертности от скученности но при $N(t)$. β — коэффициент независимой смертности, учтём небольшое запаздывание \mathfrak{h} . Начальные условия: $N(0) = \lambda N(\tau)$, $w(0) = w_0$, λ — средняя плодовитость особей. Так получим вычислительную структуру для дискретно-непрерывных расчетов.

VI Заключение

Предложена непрерывно-событийная модель из двух систем уравнений убыли численности поколения на сопряженных интервалах, формализующая различия плотностной и конкурентной регуляции в сезонах развития: зависящей от $N^2(t)$ текущей и исходной $N(0)$ для летней генерации. В новой сопряженной модели формирования половозрелых генераций иначе учтено влияние темпов $\dot{w} \propto v(N^{-k}(t))$ развития на выживаемость насекомых, чем ранее нами для молоди рыб. Модель (3) предполагает возможности расширения со сложным предикативным переопределением форм правой части. Для оценки пространственных неоднородностей при инвазии перспективны автоматные модели, как показано А.В. Никитиной в [9], или в алгоритме автомата с запаздыванием для системы «ресурс-потребитель» в [10].

Литература

1. Дубровская В.А., Соловьева И.В. Кризис технологии моделирования популяционных процессов и варианты ее корректировки // Технические науки и технологии. 2016. № 1. С. 248–259.
2. Соловьева Т.Н. Динамическая модель деградации запасов осетровых рыб со сложной внутривидовой структурой // Информационно-управляющие системы. 2016. № 4. С. 60–67.

3. *Борисова Т.Ю., Соловьева И.В.* Проблемные аспекты моделирования популяционных процессов и критерии их согласования // Математические машины и системы. 2017. № 1. С. 71–81.
4. *Дубровская В.А., Трофимова И.В.* Модель динамики структурированных субпопуляций осетровых рыб каспия с учетом отклонений в темпах развития молоди // Журнал Белорусского государственного университета. Биология. 2017. № 3. С. 76–86.
5. *Михайлов В.В., Решетников Ю.С.* Модель динамики популяции рыб с расчетом темпов роста особей и сценариев гидрологической обстановки // Информационно-управляющие системы. 2018. № 4. С. 31–38.
6. *Дубровская В.А.* О критериях обоснованности для анализа нелинейных эффектов в моделях эксплуатируемых популяций // Проблемы механики и управления: Нелинейные динамические системы. 2016. № 48. С. 74–83.
7. *Переварюха А.Ю.* Моделирование эффекта волнообразной кривой воспроизводства популяций рыб // Экологические системы и приборы. 2008. № 8. С. 41–44.
8. *Переварюха А.Ю.* Моделирование неустойчивого критического равновесия в популяционной динамике // Проблемы механики и управления: Нелинейные динамические системы. 2013. № 45. С. 82–91.
9. *Nikitina A.V.* Mathematical modeling of the delay process in regulation of population dynamics based on the theory of cellular automation // Computational Mathematics and Information Technologies. 2019. Т. 1. № 1. С. 35–49.
10. *Переварюха А.Ю.* Запаздывание в регуляции популяционной динамики — модель клеточного автомата // Динамические системы. 2017. Т. 7 (35). № 2. С. 157–165.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ИНТЕНСИВНЫХ ПУЧКОВ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ В ПРОТЯЖЕННЫХ СИСТЕМАХ¹

Свешников В.М.

Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, Новосибирск

Введение

Под протяженной понимается система, в которой размер в направлении движения пучка намного больше поперечного размера. Формирование пучка проводится в приэмиттерной части системы, а в оставшейся части, назовем ее основной, его доускорение. В приэмиттерной части потенциал мал (порядка десятков вольт). Он находится в пределах погрешности расчета потенциала в основной части (порядка сотен тысяч вольт). Действительно, если расчеты проводятся с погрешностью десятых долей процента, то это сопоставимо с потенциалом в приэмиттерной части системы.

Указанные свойства протяженных систем вызывают определенные трудности при проведении расчетов на сетках (структурированных и неструктурированных), покрывающих всю расчетную область, приводящие к понижению точности и увеличению времени вычислений. Ниже предлагаются технологии расчетов, позволяющие избежать данных недостатков.

I Альтернирующий метод Шварца

Для ослабления влияния разномасштабности задачи было принято решение разбить расчетную область G на подобласти G_1 и G_2 с общей границей γ . В G_1 происходит формирование и разгон пучка, а в G_2 – его доускорение. Разбиение проводится сечением $z = z_\gamma$, где z_γ задается значительно меньше длины всей системы (предполагается, что пучок движется вдоль оси z цилиндрической системы координат (r, z)). Решение задачи проводится итерационным альтернирующим методом Шварца [1] с наложением подобластей, суть которого состоит в следующем. На γ задается потенциал, следующий из известного закона "трех вторых"[2], который служит начальным приближением для итерационного процесса. Решается самосогласованная задача в G_1 . Из ее решения рассчитывается потенциал на границе γ' , образованной сечением $z = z'_\gamma$, а также координаты и скорости электронов. Используя полученные краевые и начальные условия, в подобласти G_2 решается самосогласованная задача. Из ее решения находится новый

¹Работа поддержана базовым проектом 0315-2019-0008

потенциал, координаты и скорости электронов на γ и повторяется решение самосогласованной задачи в G_1 . Итерации повторяются до сходимости потенциала на γ , означающей, что решение задачи получено.

II Квасиструктурированная сетка

Исходная задача рассматривается в осесимметричном двумерном приближении в цилиндрических координатах. Расчеты проводятся на адаптивной квазиструктурированной локально-модифицированной сетке, суть построения которой заключается в следующем.

Опишем вокруг исследуемой области G с границей Γ прямоугольник Q . Построим в Q равномерную прямоугольную макросетку вида

$$\Omega_H = \{R_I = IH_r, Z_J = JH_z, I = 0, 1, \dots, N_r, J = 0, 1, \dots, N_z\},$$

где N_r, N_z – заданы. Тем самым проводится декомпозиция области на непесекающиеся подобласти. Среди них могут оказаться внешние подобласти, не содержащие точек G . Такие подобласти исключаются из расчетов, а во всех остальных подобластях проводятся расчеты. В каждой расчетной подобласти строится своя равномерная прямоугольная подсетка вида

$$\omega_h = \{r_i = R_I + ih_r, j = Z_J + jh_z\}.$$

Подчеркнем, что подсетки могут быть несогласованными. Объединение данных подсеток образует результирующую квазиструктурированную сетку, на которой ищется решение исходной задачи.

Граница сопряжения подобластей (интерфейс) состоит из ребер e и макроузлов m . На ребрах интерфейса вводится сетка ω_e .

Для сшивки решений в подобластях при расчете потенциала электрического поля на ребрах вводится уравнение Пуанкаре – Стеклова

$$\left(\frac{\delta\varphi}{\delta\vec{n}}\right)_e^+ - \left(\frac{\delta\varphi}{\delta\vec{n}}\right)_e^- = 0,$$

где \vec{n} – нормаль к ребру e , которое аппроксимируется на сетке ω_e системой линейных алгебраических уравнений. Данная система решается каким-либо методом в подпространствах Крылова [3].

Вблизи катода и в области прохождения пучка, строятся густые подсетки для того, чтобы тщательно отследить поведение пучка, а к периферии они разрежаются. Регулировка плотности узлов подсеток обеспечивает адаптацию квазиструктурированной сетки к пучку.

Подсетки вблизи криволинейной границы подвергаются локальной модификации, состоящей в сдвиге на границу приграничных узлов, отстоящих от границы на расстоянии менее половины шага подсетки. Вследствие этого, исключается появление некачественных сеточных шаблонов с сильно

неравномерными шагами, аппроксимация исходной задачи на которых дает большую погрешность. Локальная модификация обеспечивает адаптацию квазиструктурированной сетки к границе области.

III Выделение прикатодной особенности

Задача анализа пучков заряженных частиц в режиме ограничения тока пространственным зарядом, как известно, имеет вблизи катода особенность вида $d^{\frac{4}{3}}$ [2], где d – расстояние от текущей точки до катода. Численные алгоритмы и программы для решения данной задачи обычно строятся без учета прикатодной особенности, что может не обеспечить достаточной точности расчетов. Измельчение разностной сетки, на которой ищется решение, в этом случае приводит к скачкам погрешности, сопровождающимся ее возрастанием, а не уменьшением.

Для выделения прикатодной особенности в настоящей работе предложены и реализованы численные алгоритмы расчета интенсивных пучков заряженных частиц, основанные на декомпозиции исходной области на прикатодную и основную подобласти. Прикатодную подобласть предлагается строить топологически эквивалентной прямоугольной, что обеспечивает равное удаление точек старта частиц в основной подобласти от особой поверхности катода. Решение в прикатодной подобласти ищется аналитически на основе антипараксиальных разложений В.А. Сырового [4], которые учитывают кривизну эмиттера (катода) и неоднородность плотности тока на нем. В основной подобласти решение находится численными методами на предложенной квазиструктурированной сетке. Сшивка решений в прикатодной и основной подобластях осуществляется при помощи внешнего итерационного процесса по решению нелинейного уравнения Пуанкаре – Стеклова [5] методом Бройдена [6].

Проведенные численные эксперименты [7] дают хорошее совпадение с результатами натуральных экспериментов.

Литература

1. Годунов С.К. Уравнения математической физики. Москва: Наука, 1979. 392 с.
2. Алямовский И.В. Электронные пучки и электронные пушки. Москва: Советское радио, 1966. 454 с.
3. Ильин В.П. Методы и технологии конечных элементов. Новосибирск: Изд-во. ИВМиМГ СО РАН, 2007. 370 с.
4. Сыровой В.А. Введение в теорию интенсивных пучков заряженных частиц. Москва: Энергоатомиздат, 2004. 486 с.

5. *Свешников В.М.* Нелинейное уравнение Пуанкаре – Стеклова и его решение в задачах электронной оптики // *Нелинейный мир.* 2014. N 1. С. 20–25.
6. *Дэннис Дж., Шнабель Р.* Численные методы безусловной оптимизации и решения нелинейных уравнений. Москва: Мир, 1988. 440 с.
7. *Astrelin V.T., Vorobyov M.S., Kozyrev A.N., Sveshnikov V.M.* Numerical simulation of the operation of a wide-aperture electron gun with a grid plasma emitter and beam extraction into the atmosphere // *Journal of Applied Mechanics and Technical Physics.* 2019. Vol. 60. N 5. P. 785–792.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ЗАТОПЛЕНИЯ/ОСУШЕНИЯ ДЕЛЬТОВОЙ ОБЛАСТИ ДОНА¹

Чикин А.Л.* , Чикина Л.Г.**

* ЮНЦ РАН, Ростов-на-Дону

** ЮФУ, Ростов-на-Дону

Устьевая область Дона состоит из устьевого участка реки (от станицы Раздорской до вершины дельты в районе г. Ростова-на-Дону), дельты Дона и Таганрогского залива и характеризуется проявлением здесь сгонно-нагонных колебаний уровня. В ее пределах наблюдаются такие опасные и неблагоприятные процессы, как сгонно-нагонные колебания уровня, заиление рукавов и морских каналов, а также поступление морских трансформированных вод в рукава дельты Дона.

I Расчет гидродинамических параметров

Расчет течений и уровня поверхности воды в Таганрогском заливе проводится с помощью двухслойной математической модели [1].

При расчете гидродинамических параметров течения рассматривается случай, когда движение воды осуществляется за счет действия ветра на поверхность водоема.

Проведем горизонтальную секущую плоскость, отстоящую от невозмущенной поверхности водоема P_0 на глубине, равной максимальной глубине мелководья (Рис. 1), и разобьем всю область моделирования на два слоя: верхний – I и нижний слой II. Таким образом, I – все мелководье и верхняя часть глубоководного слоя, II – глубоководный слой.

Предполагается, что на движение воды в слое I влияет ветер, а движение в слое II инициируется как градиентами давления, так и движением слоя I.

Систему координат выберем следующим образом. Плоскость XOY совместим с невозмущенной поверхностью водоема P_0 , ось OZ направим вверх.

Движение воды в верхнем слое I описывается уравнениями мелкой воды:

$$\frac{\partial u_s}{\partial t} + u_s \frac{\partial u_s}{\partial x} + v_s \frac{\partial u_s}{\partial y} - \Omega v_s = -g \frac{\partial \zeta}{\partial x} + \nu_{xy} \left(\frac{\partial^2 u_s}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_s}{\partial y^2} \right) + \frac{\tau_{sx}}{H} - \frac{\tau_{bx}}{H}, \quad (1)$$

$$\frac{\partial v_s}{\partial t} + u_s \frac{\partial v_s}{\partial x} + v_s \frac{\partial v_s}{\partial y} + \Omega u_s = -g \frac{\partial \zeta}{\partial y} + \nu_{xy} \left(\frac{\partial^2 v_s}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_s}{\partial y^2} \right) + \frac{\tau_{sy}}{H} - \frac{\tau_{by}}{H}, \quad (2)$$

¹ Публикация подготовлена в рамках реализации ГЗ ЮНЦ РАН № гр. проекта АААА-А18-118122790121-5

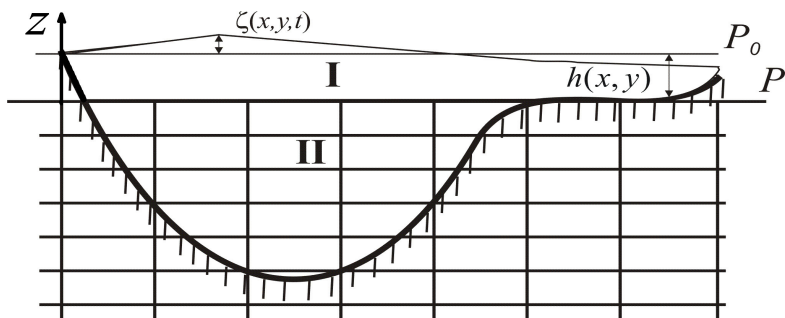


Рис. 1. Вертикальный разрез водоема с большой неоднородностью глубин

$$\frac{\partial \zeta}{\partial t} + \frac{\partial H u_s}{\partial x} + \frac{\partial H v_s}{\partial y} = 0. \quad (3)$$

Здесь $H = h + \zeta$; u_s, v_s – осредненные по вертикали скорости в слое I; τ_{sx}, τ_{sy} – проекции на оси OX и OY силы трения ветра о поверхность водоема; τ_{bx}, τ_{by} – проекции на оси OX и OY силы трения жидкости о дно.

Движение воды в глубоководном слое II описывается системой, состоящей из уравнений количества движения и уравнения неразрывности среды:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + w \frac{\partial u}{\partial z} - \Omega v = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} + \nu_{xy} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\nu_z \frac{\partial u}{\partial z} \right), \quad (4)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + w \frac{\partial v}{\partial z} + \Omega u = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y} + \nu_{xy} \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\nu_z \frac{\partial v}{\partial z} \right), \quad (5)$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0. \quad (6)$$

К системе уравнений (4)-(6) добавляется уравнение гидростатического давления

$$p = g\rho(\zeta - z) + p_a. \quad (7)$$

В (4)-(6) и (7) u, v, w – компоненты скорости; x, y, z, t – пространственные переменные и время соответственно; ζ – возмущение уровня воды; p_a – атмосферное давление; Ω – коэффициент Кориолиса; ν_{xy}, ν_z – коэффициенты горизонтальной и вертикальной вязкости соответственно; ρ – плотность воды; $g = 9,8 \text{ м/с}^2$ – ускорение силы тяжести.

II Определение затопляемой и осушаемой областей

Алгоритм изменения береговой линии за счет осушения или затопления области расчета основан на определении принадлежности расчетных ячеек к суше или к воде. На рис.2 представлена блок-схема алгоритма определения береговой линии водоема в случае сгонно-нагонных явлений.



Рис. 2. Блок-схема алгоритма расчета области затопления и осушения

На акваториальной поверхности с использованием массива глубин исследуемого водоема строится равномерная по каждому направлению двумерная сетка с шагами h_1 и h_2 . В узлы плоской прямоугольной разностной сетки, покрывающей акваторию, записываются значения глубин, а в узлы сетки, покрывающей предполагаемую область затопления, записываются значения высот. Разностные ячейки представляют прямоугольник. Учитывая значения глубин в узлах плоской сетки, определяются ячейки, находящиеся в воде или на суше. Логический массив KG, характеризующий тип ячеек ("вода",

"суша"), задает конфигурацию всей расчетной области. В процессе расчета некоторые ячейки с малой глубиной могут осушаться в силу сгонного явления и переходить в разряд "суша". Это происходит в том случае, если величина $H + \zeta$ перестает быть положительной. Ячейки, перешедшие в разряд "суша", в силу сгонного явления могут возвращаться в разряд "вода". Также в разряд "вода" могут попадать ячейки "суша" в предполагаемой области затопления. Это происходит в том случае, если наблюдается повышение уровня воды и средняя по соседним ячейкам глубина не меньше устанавливаемого критического значения h_{cr} . Значение глубины в текущей ячейке задается с учетом закона сохранения массы.

Во всех случаях изменения характера разностных ячеек необходимо проводить переиндексацию всей расчетной области.

III Результаты численных расчетов

Были проведены расчеты районов затопления в дельтовой области Дона, которая может затапливаться и осушаться за счет нагона и последующего сгона воды. Вместе с дельтовой областью рассматривался и Таганрогский залив, в котором формировался экстремальный нагон воды.

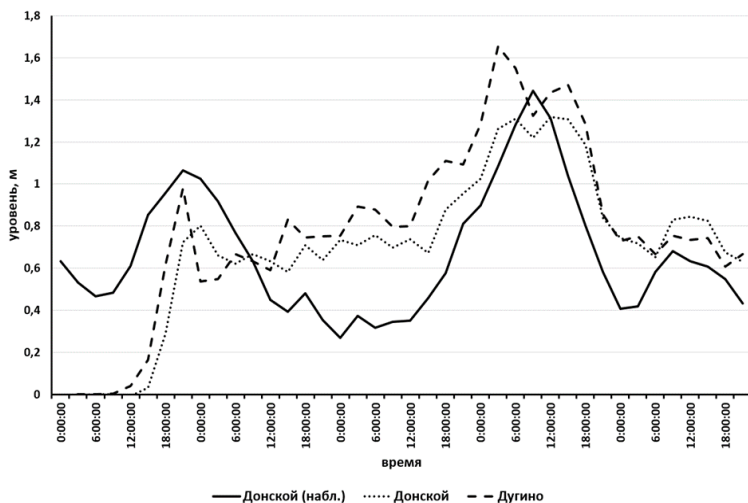


Рис. 3. Рассчитанный и наблюдаемый уровни воды в Донском, а также рассчитанный уровень в Дурино

Сравнение расчетных значений уровня воды и наблюдаемых проводилось для периода с 19 по 23 апреля 2018 года, когда наблюдался сильный нагон.

Ветровая ситуация на данный период бралась из архивов метеоданных. Данные по уровню воды снимались на метеостанции Южного научного центра в х. Донском, находящейся в устье рукава Дона и попадающей в предполагаемую область затопления. Кроме того, были получены значения уровня воды в точке, расположенной в 20 км вверх по течению рукава Большая Каланча (х. Дугино), где затопление возможно только при сильном нагоне воды. На рис. 3 представлены расчетные и наблюдаемые значения уровня воды на посту Донской, а также расчетные значения в х. Дугино.

Расчитанные значения хорошо коррелируют с наблюдаемыми значениями в п. Донской. Большие расхождения расчетных и наблюдаемых значений, возможно, объясняется заданием начального нулевого распределения параметров расчета, а также возможными проблемами в калибровке модели. Расчеты на этот период показали наилучшее совпадение с наблюдаемыми значениями уровня воды.

IV Заключение

Использование двухслойной модели гидродинамики при расчете течений в Таганрогском заливе позволяет определять изменение уровня воды во всей дельтовой области Дона, где предполагается затопление. Приведенный алгоритм изменения береговой линии дельтовой области Дона дает возможность проводить расчеты гидродинамических параметров в областях с изменяемой твердой границей.

Литература

1. *Chikin A. L.* A technique for evaluating flow parameters in water bodies with a highly heterogeneous depth // *Water Resources*. 2005. Volume 32. N 1. January. P. 50-55.

РЕШЕНИЕ

XIX ВСЕРОССИЙСКОЙ КОНФЕРЕНЦИИ-ШКОЛЫ МОЛОДЫХ
ИССЛЕДОВАТЕЛЕЙ
"СОВРЕМЕННЫЕ ПРОБЛЕМЫ МАТЕМАТИЧЕСКОГО
МОДЕЛИРОВАНИЯ", посвященной памяти Л.А. Крукиера

С 13 по 18 сентября 2021 состоялась XIX Всероссийская конференция-школа молодых исследователей "СОВРЕМЕННЫЕ ПРОБЛЕМЫ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ", посвященной памяти Л.А. Крукиера.

В работе Конференции-школы приняли участие 49 ученых из 10 городов России, представлявшие 16 научных центра. Из них 15 докторов наук, 7 кандидатов наук, 5 аспирантов и 4 студента. Было прочитано 14 лекций ведущими российскими учеными в области математического моделирования, сделаны 15 докладов исследователями различных научных центров, из которых 12 докладов были сделаны молодыми учеными.

Подводя итоги проведенной Конференции-школы, участники отмечают

- высокий научный уровень большинства представленных докладов, разнообразие тематик и новые оригинальные подходы к решению задач математического моделирования;
- в то же время снижение количества молодых ученых, участвующих в работе Конференции-школы;

и постановляют

- выразить благодарность Карякину М.И., Наседкину А.В., Головизнину В.М. и Ганченко Г.С. за привлечение к работе школы молодых ученых из возглавляемых ими научных коллективов;
- выразить благодарность Оргкомитету за проведенную им работу по организации конференции-школы;
- выразить благодарность администрации и сотрудникам пансионата "Моряк" за помощь в проведении Конференции-школы;
- опубликовать Труды Конференции-школы и рекомендовать к публикации в журнале «Вычислительные методы и программирование» наиболее интересные доклады;
- разместить презентации лекций на сайте Конференции-школы;
- наметить проведение XX Всероссийской конференции-школы "СОВРЕМЕННЫЕ ПРОБЛЕМЫ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ" на 2023 год.

Научное издание

**СОВРЕМЕННЫЕ ПРОБЛЕМЫ
МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ**

Сборник трудов

**ХІХ ВСЕРОССИЙСКОЙ КОНФЕРЕНЦИИ-ШКОЛЫ
МОЛОДЫХ ИССЛЕДОВАТЕЛЕЙ**
пос. Абрау-Дюрсо, 13–18 сентября 2021 г.

Технический редактор Майер С.Ф.

Подписано в печать 09.12.2021 г.

Бумага офсетная. Формат 60×84¹/₁₆. Тираж 100 экз.

Усл. печ. лист. 4,19. Уч. изд. л. 3,0. Заказ № 8268.

Отпечатано в отделе полиграфической, корпоративной и сувенирной продукции
Издательско-полиграфического комплекса КИБИ МЕДИА ЦЕНТРА ЮФУ.
344090, г. Ростов-на-Дону, пр. Стачки, 200/1, тел (863) 243-41-66.