



WWW.CMIT-JOURNAL.RU

ISSN 2587-8999
DOI: 10.23947/2587-8999

Computational Mathematics and Information Technology

Т. 6,
№ 1. 2023

Учредитель и издатель — Донской государственный
технический университет

Свидетельство о регистрации СМИ № ФС 77-66529



Computational Mathematics and Information Technologies

Т. 6, № 1, 2023

Теоретический
и научно-практический журнал

Издаётся с 2017 г.

Выходит 4 раза в год.
Январь-март 2023 г.

ISSN 2587-8999

DOI: 10.23947/2587-8999

Учредитель и издатель Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Донской государственный технический университет» (ДГТУ)

Журнал «Computational Mathematics and Information Technologies» ориентирован на фундаментальные и прикладные исследования по следующим научным разделам:

1. Вычислительная математика
2. Математическое моделирование
3. Информационные технологии

Журнал включен в Российский индекс научного цитирования (РИНЦ) и научные электронные библиотеки eLIBRARY.RU, CrossRef, КиберЛенинка.

Свидетельство о регистрации средства массовой информации ЭЛ № ФС 77 – 66529
от 21 июля 2016 г., выдано Федеральной службой по надзору в сфере связи,
информационных технологий и массовых коммуникаций

Над номером работали:

Петров Александр Пхоун Чжо — доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник, Институт прикладной математики им. М. В. Келдыша РАН (Москва, Россия)

Петров Игорь Борисович — член-корреспондент РАН, доктор физико-математических наук, профессор, Московский физико-технический институт (государственный университет), (Москва, Россия)

Сушинов Александр Иванович — член-корреспондент РАН, доктор физико-математических наук, профессор, Донской государственный технический университет (Ростов-на-Дону, Россия)

Якобовский Михаил Владимирович — член-корреспондент РАН, доктор физико-математических наук, профессор, Институт прикладной математики им. М. В. Келдыша РАН (Москва, Россия)

Адрес учредителя, издателя и редакции:

344003, Российская Федерация, г. Ростов-на-Дону, пл. Гагарина, 1, тел. +7(863) 273–85–14

E-mail: CMIT-EJ@yandex.ru

<https://cmit-journal.ru/>

Редакционная коллегия:

Главный редактор — Сухинов Александр Иванович — член-корреспондент РАН, доктор физико-математических наук, профессор, Донской государственный технический университет (Ростов-на-Дону, Россия): [MathSciNet](#), [eLibrary.ru](#), [ORCID](#), [Researcherid](#), [Scopus](#), sukhinov@gmail.com, spu-40.4@donstu.ru

Заместитель главного редактора — Якобовский Михаил Владимирович — член-корреспондент РАН, доктор физико-математических наук, профессор, Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН (Москва, Россия): [eLibrary.ru](#), [ORCID](#)

Ответственный секретарь — Петров Александр Пхоун Чжо, доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник, Институт прикладной математики им. М. В. Келдыша РАН (Москва, Россия): [eLibrary.ru](#), [ИСТИНА](#), [ORCID](#), [Researcherid](#), [Scopus](#)

Воеводин Владимир Валентинович — член-корреспондент РАН, доктор физико-математических наук, профессор, Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова (Москва, Россия)

Гасилов Владимир Анатольевич — доктор физико-математических наук, профессор, Институт прикладной математики им. М. В. Келдыша РАН (Москва, Россия)

Гущин Валентин Анатольевич — член-корреспондент РАН, доктор физико-математических наук, профессор, Институт автоматизации проектирования РАН (Москва, Россия)

Марчук Владимир Иванович — доктор технических наук, профессор, Донской государственный технический университет (Ростов-на-Дону, Россия)

Петров Игорь Борисович — член-корреспондент РАН, доктор физико-математических наук, профессор, Московский физико-технический институт (государственный университет) (Москва, Россия)

Поляков Сергей Владимирович — доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник, Институт прикладной математики им. М. В. Келдыша РАН (Москва, Россия)

Поспелов Игорь Гермогенович — член-корреспондент РАН, доктор физико-математических наук, профессор, Вычислительный центр РАН (Москва, Россия)

Тишкин Владимир Федорович — член-корреспондент РАН, доктор физико-математических наук, профессор, Институт прикладной математики им. М. В. Келдыша РАН, г. Москва

Четверушкин Борис Николаевич — академик РАН, доктор физико-математических наук, профессор, научный руководитель Института прикладной математики им. М. В. Келдыша РАН (Москва, Россия)

Чистяков Александр Евгеньевич — доктор физико-математических наук, профессор, Донской государственный технический университет (Ростов-на-Дону, Россия)

СОДЕРЖАНИЕ

70 лет Игорю Борисовичу Петрову — члену-корреспонденту Российской академии наук	4
Петров И. Б. Сеточно-характеристические методы. 55 лет разработки и решения сложных динамических задач	6
Сушинов А. И. Об аналитическом решении для модели рекламы двух конкурирующих фирм	22
Голубев В. И., Шевченко А. В., Екименко А. В., Петрухин В. Ю. Прямое численное моделирование: топография дневной поверхности и анизотропия верхней части разреза	27
Проценко Е. А., Панасенко Н. Д., Стражко А. В. Моделирование пространственно-трехмерных волновых процессов в мелководных водоемах с учетом особенностей вертикального турбулентного обмена	34
Переварюха А. Ю. Соответствие биофизическим критериям нелинейных эффектов при возникновении каскада бифуркаций Фейгенбаума в моделях инвазионных процессов	41
Петров И. Б. Семейство методов обратных характеристик	53
Хуснуллин Ш. Р., Коледина К. Ф., Алимбекова С. Р., Ишмуратов Ф. Г. Машинное обучение в анализе влияния электромагнитного поля на скорость коррозии и солеотложения нефтепромыслового оборудования	70
Слепнёв С. В., Коледина К. Ф. Прогнозирование кинетики сложных процессов люминесценции на Python	77
Мисюра В. В., Мисюра Е. В. Прогнозирование тенденций развития временных рядов с помощью оценки медианы Ходжеса-Лемана	83

70 лет Игорю Борисовичу Петрову — члену-корреспонденту Российской академии наук



8 февраля 2023 года исполнилось 70 лет члену-корреспонденту РАН, доктору физико-математических наук, профессору, заслуженному профессору Московского физико-технического института Игорю Борисовичу Петрову.

Научные интересы юбиляра — это, в первую очередь, компьютерные методы решения динамических систем уравнений в частных производных и численное моделирование процессов, происходящих в деформируемых средах при их динамическом нагружении.

Научная деятельность Игоря Борисовича неразрывно связана с Московским физико-техническим институтом, в который он поступил в 1970 году на факультет «Аэрофизика и космические исследования». После окончания института, в 1976 году, он был распределен на кафедру вычислительной математики МФТИ на должность младшего научного сотрудника. В 1983 году там же защитил диссертацию на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук. В 1991 году на этой же кафедре защитил диссертацию на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по теме «Численное исследование задач динамики деформируемых сред сеточно-характеристическими методами».

Игорь Борисович впервые применил сеточно-характеристический метод к численному решению задач механики деформируемого твердого тела, геофизики, биомеханики, контактных задач. Вместе с членом-корреспондентом РАН Александром Сергеевичем Холодовым он разработал гибридные сеточно-характеристические схемы для численного решения этого класса задач, основанные на подходе, использующем пространство неопределенных коэффициентов, а также распространил их на многомерный случай. Игорем Борисовичем был рассмотрен широкий класс задач о высокоскоростном соударении деформируемых тел в широком диапазоне скоростей соударения с использованием различных нелинейных реологических моделей, в том числе упругопластических, вязкоупругих, а также повреждаемых сред.

В последние годы профессор большое внимание уделяет решению геофизических задач и задач сейсморазведки, задачам сейсмостойкости наземных сооружений, астероидной опасности, безопасности железных дорог, а также задачам биологии и медицины. Проведенное моделирование сейсмических сигналов-откликов от основных типов трещиноватых карбонатных и сланцевых коллекторов при заполнении флюидом, газом и при схлопнутых трещинах выявило возможность определить смену насыщенности коллектора.

Значительных успехов ученый достиг в решении задач освоения Арктического шельфа Северных морей Российской Федерации. Игорь Борисович развивает перспективное направление, связанное с численным моделированием поведения композитных элементов авиационных и космических аппаратов под воздействием аэродинамических нагрузок, и с задачами неразрушающего контроля повреждений этих элементов. Профессором ведется разработка новых численных методов из класса сеточно-характеристических. Также уделяется внимание и решению обратных задач, в том числе, с применением нейронных сетей, когда для формирования обучающей выборки используются результаты высокоточного численного решения соответствующей прямой задачи.

На сегодняшний день Игорь Борисович Петров — один из ведущих специалистов в области информатики, прикладной математики, компьютерного моделирования. Он является автором 445 научных и 24 учебно-методических работ, соавтором 4 монографий и 4 учебников, 4 научных сборников издательства SPRINGER, имеет 4 патента, 3 авторских свидетельства о государственной регистрации программ ЭВМ.

И. Б. Петров ведет активную преподавательскую деятельность. Более 40 лет он занимается научной работой со студентами и аспирантами МФТИ. Под его руководством защищены 26 кандидатских (с учениками учеников — 54) и 5 докторских диссертаций.

Игорь Борисович — член редколлегии 8 научных журналов; член Ученого Совета МФТИ; председатель диссертационных Советов МФТИ; член диссертационных советов ИПМ РАН, ИВМ РАН, МГУ; председатель Государственных аттестационных комиссий МГУ, БФУ, Иннополис; руководитель грантов РФФИ, РНФ; эксперт советов РАН, РФФИ. Он — заслуженный работник высшей школы РФ, почетный деятель науки и техники

г. Москвы, заслуженный профессор МФТИ, почетный профессор университета Иннополис и Сианьского университета (Китай), член секции математических наук при Координационном совете фундаментальных научных исследований РФ, член национального комитета по индустриальной и прикладной математике.

За выдающиеся заслуги ученый неоднократно поощрялся наградами и медалями, среди которых медаль ордена «За заслуги перед Отечеством» 2-ой степени и знак МФТИ «Звезда Физтеха».

От всей души поздравляем Игоря Борисовича с юбилеем! Желаем ему здоровья, счастья, а также успехов в дальнейшей научной и образовательной деятельности.

*Член-корреспондент РАН В. В. Воеводин;
доктор физико-математических наук В. А. Гасилов;
член-корреспондент РАН В. А. Гуцин;
доктор технических наук В. И. Марчук;
доктор физико-математических наук А. П. Петров;
доктор физико-математических наук С. В. Поляков;
член-корреспондент РАН А. И. Сухинов;
член-корреспондент РАН В. Ф. Тишкин;
академик РАН Б. Н. Четверушкин;
доктор физико-математических наук А. Е. Чистяков;
академик РАН А. А. Шананин;
член-корреспондент РАН М. В. Якобовский.*

УДК 519.63

Обзорная статья

<https://doi.org/10.23947/2587-8999-2023-6-1-6-21>**Сеточно-характеристические методы. 55 лет разработки и решения сложных динамических задач****И. Б. Петров**  

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), Российская Федерация, Московская область, г. Долгопрудный, Институтский переулок, 9

✉ petrov@mipt.ru**Аннотация**

Разработка вычислительного метода не является делом простым и сводящимся к замене дифференциального оператора разностным. Для его построения необходимо грамотно поставить математическую задачу, адекватную рассматриваемой физической. Кроме того, алгоритм должен удовлетворять и некоторым другим требованиям. Поэтому для создания численного алгоритма нужна не только изобретательность и фантазия, но и глубокое понимание причин, которыми эти требования вызываются.

Для описания нестационарного поведения сплошных сред используются системы дифференциальных уравнений в частных производных гиперболического типа. Для решения этих проблем характеристические методы разрабатывались таким образом, чтобы учесть соответствующие свойства гиперболических уравнений и иметь возможность строить так называемую характеристическую, адаптирующую к решению задачи, нерегулярную сетку. Разработаны методы сквозного счета, учитывающие свойства систем уравнений гиперболического типа — обратные методы характеристик или сеточно-характеристические методы.

В сеточно-характеристических методах используется регулярная расчетная сетка, на которой аппроксимируется не решаемая исходная система, а условия совместимости вдоль характеристических линий с интерполяцией искомых функций в точках пересечения характеристик с координатной линией, на которой данные уже известны. Полученная характеристическая форма уравнений газовой динамики позволяет понять, как правильно ставить граничные условия.

При разработке метода необходимо учитывать физическую сторону решаемой задачи. При этом метод должен удовлетворять определенным требованиям, понимание которых необходимо при его разработке.

Ключевые слова: численные методы, системы дифференциальных уравнений гиперболического типа, волновые процессы, численные решения на характеристических сетках, нерегулярная сетка, сеточно-характеристические методы.

Для цитирования. Петров, И. Б. Сеточно-характеристические методы. 55 лет разработки и решения сложных динамических задач / Б. И. Петров // Computational Mathematics and Information Technologies. — 2023. — Т. 6, № 1. — С. 6–21. <https://doi.org/10.23947/2587-8999-2023-6-1-6-21>

*Review article***Grid-characteristic methods. 55 years of developing and solving complex dynamic problems****I. B. Petrov**  

Moscow Institute of Physics and Technology (National Research University), 9, Institutsky Lane, Dolgoprudny, Moscow Region, Russian Federation

✉ petrov@mipt.ru**Abstract**

The development of a computational method is not a simple matter and boils down to replacing the differential operator with a difference one. To construct it, it is necessary to correctly set a mathematical problem that is adequate to the physical one under consideration. In addition, the algorithm must meet some other requirements. Therefore, to create a numerical algorithm requires not only ingenuity and imagination, but also a deep understanding of the reasons why these requirements are caused.

Systems of partial differential equations of hyperbolic type are used to describe the unsteady behavior of continuous media. To solve these problems, characteristic methods were developed in such a way as to take into account the corresponding properties of hyperbolic equations and to be able to build a so-called characteristic irregular grid adapting to the solution of the problem. Methods of end-to-end counting have been developed that take into account the properties of systems of hyperbolic equations — inverse methods of characteristics or grid-characteristic methods.

In grid-characteristic methods, a regular computational grid is used, not a solvable initial system is approximated on it, but compatibility conditions along characteristic lines with interpolation of the desired functions at the points of intersection of characteristics with a coordinate line on which the data is already known. The obtained characteristic form of the gas dynamics equations makes it possible to understand how to set the boundary conditions correctly.

The construction of a numerical method is not a simple matter and is not reduced to the formal replacement of derivatives by approximating their difference relations (for example, using finite differences). When developing the method, it is necessary to take into account the physical side of the problem being solved. At the same time, the method must meet certain requirements, the understanding of which is necessary during its development.

Keywords: numerical methods, systems of hyperbolic differential equations, wave processes, numerical solutions on characteristic grids, irregular grid, grid-characteristic methods.

For citation. Petrov, I. B. Grid-characteristic methods. 55 years of developing and solving complex dynamic problems / I. B. Petrov // Computational Mathematics and Information Technologies. — 2023. — Vol. 6, no. 1. — P. 6–21. <https://doi.org/10.23947/2587-8999-2023-6-1-6-21>

Для описания нестационарного поведения сплошных сред — газ, твердое деформируемое тело, жидкость, плазма — обычно используются системы дифференциальных уравнений в частных производных гиперболического типа. Это системы Эйлера в газодинамике, Ламэ — в теории упругости, Тимошенко — в теории оболочек, Максвелла — в магнитной гидродинамике, Био — во флюидонасыщенных пористых средах, система Марчука в климатологии и океанологии, и др. Области применения таких систем обширны. Соответствующие численные методы, применявшиеся для решения этих систем, берут начало в 40–50-х годах XX века. Их развитие было связано, в первую очередь, с необходимостью предсказания последствий ядерного взрыва (последствия трагедии Хиросимы и Нагасаки и дальнейшая реализация ядерной программы в Советском Союзе, которая представляла собой необходимый противовес ядерной угрозе из-за океана). Вскоре появились задачи об обтекании затупленных тел в плотных слоях атмосферы, движущихся с гиперзвуковыми скоростями (проблема доставки). Были созданы первые разностные схемы для решения задач газовой динамики — Лакса, Лакса-Вендроффа, Куранта-Изаксона-Риса (Годунова), Ландау-Меймана-Халатникова, Русанова и др. Подробное описание истории схем и их обзор можно найти в известных работах [1–13].

У систем дифференциальных уравнений гиперболического типа есть наиболее общие свойства:

- уравнения описывают волновые процессы, распространение слабых возмущений или волнового фронта;
- в случае линейных задач о распространении волновых фронтов, характеристики могут быть найдены независимо от решения рассматриваемого уравнения (или системы уравнений), что позволяет получать точные решения Даламбера, Кирхгоффа, а также численные решения на характеристических сетках;
- в случае нелинейных уравнений в частных производных возможно пересечение характеристик при возникновении разрывов;
- характеристические свойства уравнений гиперболического типа позволяют изучать вопросы корректности постановки начально-краевых задач, например, определять количество краевых условий и условий на поверхностях раздела сред.

Главной особенностью уравнений или систем дифференциальных уравнений гиперболического типа является конечная скорость распространения волн (или возмущений) в среде, а также наличие характеристических поверхностей (линий — в одномерном случае), обозначающих область зависимости решений. На этих поверхностях число независимых переменных уменьшается на единицу. Впервые характеристические свойства таких систем были изучены в работе [14], где было введено понятие инвариантов Римана. Численные методы, учитывающие характеристические свойства гиперболических систем уравнений, подробно описаны в работах [2–12]. Отмечено

и то важное обстоятельство, что при помощи метода характеристик были доказаны теоремы существования, единственности и непрерывной зависимости решения классической задачи Коши по входным данным [1]. Однако эта область ограничена в нелинейном случае, поскольку, в отличие от линейного, эти решения могут иметь, по истечении некоторого времени, неограниченные первые производные — так называемая градиентная катастрофа, при которой разрывы могут возникать из гладких начальных данных. В этом случае говорят об обобщенном решении уравнений газодинамики. Под обобщенным решением, в таком случае, понимают решение, удовлетворяющее законам сохранения массы, импульса, энергии, а также неравенству, означающему возрастание энтропии в замкнутой системе. С математической точки зрения, требование возрастания энтропии гарантирует единственность обобщенного решения, а также его устойчивость по отношению к малым возмущениям. Из сказанного следует, что построение численного метода не является простым делом и не сводится к формальной замене производных аппроксимирующими их разностными соотношениями (например, с помощью конечных разностей). При разработке метода необходимо учитывать физическую сторону решаемой задачи. При этом метод должен удовлетворять определенным требованиям, понимание которых необходимо при его разработке.

Для решения этих проблем характеристические методы разрабатывались таким образом, чтобы учесть соответствующие свойства гиперболических уравнений и иметь возможность строить характеристическую, адаптирующую к решению задачи, нерегулярную сетку. Эти методы получили название прямых методов характеристик [14–17]. Прямые характеристические методы позволяют выделять разрывы двух типов: в первом случае априорно известна структура решения и расположение разрыва; во втором случае разрывы возникают со временем. Что касается первого типа разрывов, то их выделение в многомерном случае представляет собой сложную задачу, решение которой описано в [2, 7, 9]. Во втором случае численный алгоритм должен обнаруживать образующиеся со временем разрывы, после чего можно решать задачу о выделении разрыва. Решение таких задач представляет тем большие трудности, чем больше разрывов в области интегрирования. По этой причине были разработаны методы сквозного счета, учитывающие свойства систем уравнений гиперболического типа — обратные методы характеристик или сеточно-характеристические методы, (СХМ; grid-characteristic method, GCM). В этих методах используется регулярная расчетная сетка. Однако на ней аппроксимируется не решаемая исходная система, а условия совместимости вдоль характеристических линий с интерполяцией искомых функций в точках пересечения характеристик с координатной линией, на которой данные уже известны. В многомерном случае — в точках пересечения линий пересечения характеристических и координатных плоскостей с плоскостями с известными данными. Разработке этих методов посвящены работы [2, 7, 9, 18–22].

Первыми были предложены методы первого порядка точности [2, 9, 18, 23–25], затем второго [25–27] и третьего [27–30]. Впоследствии были разработаны схемы более высоких порядков [19, 31–35, 52, 54, 57, 58].

В таких подходах (методах сквозного счета) реализуется аппроксимация производных через разрывы, которые при численном решении задачи имеют область «размыва», величина которого определяется величиной численной вязкости (диссипации) используемого метода. Ширина этой зоны уменьшается с увеличением порядка точности численного метода. Кроме того, при численном решении задач с большими градиентами искомых функций методами, имеющими порядок аппроксимации выше первого, могут появляться численные (нефизичные) осцилляции. Для их устранения (или уменьшения амплитуды) используются разные подходы. В первом из них были использованы дополнительные диссипативные члены, в частности, искусственная диффузия (или вязкость), как линейная, так и квадратичная, что было опубликовано в работах Неймана и Рахтмайера [36]. Исследования свойств и модификации подобных искусственных решений можно найти и в других работах [6, 8, 36–38]. Обобщение таких диссипативных добавок на многомерный случай рассматривалось в обзорной работе [39]. Отмечено, что искусственные диссипативные члены изменяют решение исходной задачи [38], поэтому полученное численное решение задачи должно быть протестировано. В областях, где большие градиенты отсутствуют, можно использовать методы более высокого порядка точности (более первого). Последнее утверждение, а также свойство монотонности схем первого порядка аппроксимации, легло в основу идеи гибридных методов.

В теории разностных схем вводится важное понятие монотонных (мажорантных) схем или схем с положительной аппроксимацией по Фридрихсу. Такие схемы сохраняют монотонный характер численного решения (в одномерном случае) на любом временном слое, если это имеет место в точном решении задачи. Использование немонотонных разностных схем приводит к появлению нефизических осцилляций в численном решении (т. е. осцилляций, имеющих численное происхождение). Для одномерного линейного уравнения переноса С. К. Годуновым [42] была доказана теорема о том, что не существует явных линейных монотонных схем с порядком аппроксимации выше первого. В работе [37] эта теорема была распространена на случай произвольного шаблона (для неявных или многослойных схем).

Для определения монотонности разностной схемы представляются явные линейные двухслойные схемы в следующем виде:

$$v_m^{n+1} = \sum_i c_i(\tau, h) \cdot v_{m+i}^n, \quad i = 0, \pm 1, \dots,$$

где $n\tau = t^n$ (t — время; τ — шаг времени; $n = 0, 1, \dots$);

$x_m = mh$ (x — координата; h — шаг по координате, $m = 0, \pm 1, \dots$);

$v_m^n = v(t^n, x_m)$ — искомая сеточная функция.

Существует несколько определений монотонности [22].

1. Схемы, монотонные по Фридрихсу [41], для них: $c_i \geq 0$.
2. Схемы, монотонные по Годунову [42], для которых выполнены следующие неравенства: $v_m^{n+1} - v_m^n \geq 0$, при $v_{m+1}^n - v_m^n$ т. е. на всех временных слоях координатные односторонние разности не меняют знак.
3. Схемы, монотонные по Хартену [43]: $\sum_m |v_{m+1}^n - v_m^{n+1}| \leq \sum_m |v_{m+1}^n - v_m^n|$, где $TV(u_m^n) = \sum_m |v_{m+1}^n - v_m^{n+1}|$ есть полная вариация сеточной функции.
4. Разностные схемы, опирающиеся на характеристические свойства точного решения [19, 45] для которых выполнено неравенство: $\{v_1^n, v_2^n\} \leq v_m^{n+1} = v \leq \max\{v_1^n, v_2^n\}$; здесь v_1^n, v_2^n — значения сеточной функции на временном слое t^n в двух наиболее близких к исходящей из узла $\{t^{n+1}, x_m\}$, сеточных узлах (минимальное условие).

Показано, что в линейном одномерном случае все приведенные определения монотонности эквивалентны и являются достаточным условием устойчивости разностных схем.

В области гладких численных решений можно использовать разностные схемы порядка точности выше первого, т. е., в соответствии с теоремой Годунова [42], не являющиеся монотонными. Однако для устранения (либо уменьшения амплитуды), нефизических (численных) осцилляций в областях с большими градиентами решений, необходимо использовать монотонные схемы первого порядка аппроксимации. Объединение этих двух противоречивых требований было реализовано в идее построения гибридных разностных схем, которая была впервые предложена Федоренко в работе [28]. Эти схемы являются нелинейными, т. е. зависящими от решения, и могут локально, в различных точках в области интегрирования, менять порядок аппроксимации. Гибридные методы позволяют реализовывать сквозной счет с помощью схем повышенного порядка точности в областях с гладкими решениями — в областях больших градиентов численного решения. Это позволяет в одном вычислительном алгоритме объединить различные положительные качества разностных схем, имеющих разный порядок аппроксимации. Для уточнения сквозных численных решений вблизи разрывов в [46] было рекомендовано использование дифференциального анализатора ударных волн, позволяющего локализовать разрыв, используя результаты сквозного расчета, и далее уточнить численное решение. В [28] также был описан способ переключения со схемы первого порядка на схему второго В [47] были приведены гибридные схемы для линейного и квазилинейного уравнений переноса с гладким переключателем с одной схемы на другую. Гибридная схема для системы уравнений гиперболического типа на основе комбинации схем Лакса [23] и Лакса-Вендроффа [25] была предложена Хартеном [48].

В работах Ван Лира [49, 50] также был изложен специальный алгоритм монотонизации схемы Лакса-Вендроффа. Колган в [51] предложил гибридизацию схемы Годунова с использованием нескольких шаблонов, а также лимитра (ограничителя) $\minmod$. Первые гибридные сеточно-характеристические разностные схемы были

описаны в работах Холодова и Петрова в [20], а их развитие — в [11, 21, 35]. В [44] был предложен гибридный метод на основе коррекции потоков (flux corrected transport), в котором на первом этапе получается решение при помощи схемы первого порядка точности, на втором добавляется член, названный «антидиффузией», позволяющий повысить порядок до второго.

Использование идей гибридности [28], коррекции потоков [44], лимитров [49] привело к созданию TVD-схем (total variation diminishing) [43]. Обзор лимитров для этого класса гибридных методов представлен в [52].

Дальнейшее развитие TVD-методов повлекло за собой появление новых схем: ENO [53], TVB [54], TVD2, UNO, UNO2 [54], WENO [55], WAF (TORO [56]). Возникновение этих методов привело к созданию схем высокого порядка точности (high resolution schemes), например, монографии Торо, Толстых [57, 58].

При численном решении многомерных динамических задач часто приходится иметь дело с подвижными границами, сложными областями интегрирования. Для этого используются подвижные расчетные сетки [59], адаптивные сетки [60]. Теория и обзор работ по построению расчетных сеток в сложных областях интегрирования приведены в монографиях [61, 62]. В случаях, когда происходит динамический разлет частей сплошной среды (разлет газа, жидкости, плазмы при динамических воздействиях, разрушение деформируемых твердых тел при взрывах, ударах и т. д.), оказываются полезными методы частиц, впервые предложенные Харлоу [63], Белоцерковским и Давыдовым в [64] (метод крупных частиц). Другим подходом к решению аналогичных задач оказался метод сглаженных частиц (smooth partical method, SPH) [66, 67].

Дальнейшее развитие сеточно-характеристические методы получили в работах [68] (метод на неструктурированных тетраэдральных сетках), [69] (комбинированный метод: SPH и сеточно-характеристический), [34] (методы повышенного порядка аппроксимации). Класс компактных схем, позволяющих строить схемы повышенного порядка точности на компактных шаблонах, развит в работах [58, 70–72], причем в [71, 72] для их построения использовался сеточно-характеристический метод. Перспективным методом, позволяющим строить вычислительные алгоритмы повышенного порядка точности, оказался разрывный метод Галеркина [73, 74], соединяющий возможности метода конечных элементов [75] и метода Годунова [2]. Для численного решения динамических задач газовой динамики в [76] была разработана весьма эффективная схема «Кабаре» (метод прыжкового переноса), позволившая продвинуться в численном решении задач динамики плазмы. Обзор методов конечных объемов (finite volume method, FVO) для решения систем уравнений гиперболического типа, получивших в последнее десятилетие заметную популярность, приведен в монографии [77]. Численные методы, разработанные для решения задач механики сплошных сред, успешно использовались в различных приложениях. Так, среди работ, посвященных расчету аэрогидродинамическим свойствам летательных аппаратов, отмечены [2, 7, 8, 9, 17, 29 и др.], монографии, посвященные изучению гиперзвукового обтекания затупленных тел [78–80]. В [81] рассматривались задачи о гиперзвуковом обтекании деформируемой оболочки спускаемого в плотных слоях атмосферы летательного аппарата, в [82] — задача о сверхзвуковом обтекании системы тел. Расчету течений стратифицированной по плотности несжимаемой жидкости в приближении мелкой воды посвящена работа [83].

Проблемы обтекания солнечным ветром магнитосферы Земли с использованием уравнений магнитогазодинамики исследовались в [84]; акустико-гравитационные волны, возникающие в атмосфере — в [85]. Движение в атмосфере Земли астероида, его взаимодействие с поверхностью Земли, последующее распространение сейсмических волн в земной коре были рассмотрены в [86].

В [59, 35, 67–69, 74 и т.д.] можно найти примеры численного решения задач механики деформируемого твердого тела. Волновые процессы и процессы разрушения в сложных композитных конструкциях исследовались в [87–89]; задачи взаимодействия концентрированных потоков энергии и деформируемых мишеней — в [90–92]; сейсморазведки — в [93–96]; Арктического шельфа — в [97–99]; безопасности железнодорожных путей — в [100]; глобальной внутрипланетной сейсмики — в [101]; распространения электромагнитных волн — в [102–103]; медицины — в [104–107]; интенсивности уличного движения в мегаполисах (задачи на графах) — в [108]; больших электросетей — в [109]; информационных потоков в компьютерных сетях [110].

Разумеется, перечисленные статьи нельзя назвать обзором прикладных работ по численному моделированию физических процессов, поскольку их слишком много. Однако они могут дать определенную картину исследований в рассматриваемой области.

Системы дифференциальных уравнений в частных производных первого порядка для двух независимых переменных t, x имеют вид:

$$F_i\left(t, x, \frac{\partial u}{\partial t}, \frac{\partial u}{\partial x}\right) = 0, \quad i = 1 \div N. \quad (1)$$

Векторные функции, $\bar{u} = \{u_1, \dots, u_N\}^T$, имеющие первые непрерывные производные и удовлетворяющие системе уравнений (1), являются решением данной системы.

Система (2), разрешенная относительно производной по одному из независимых переменных (t или x),

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} = G_i\left(t, x, u, \frac{\partial u}{\partial x}\right) \quad (2)$$

называется нормальной формой.

В случае, если в системе дифференциальных уравнений (1) все функции F_i ($i = 1 \div N$) линейны относительно каждой из величин $u, \frac{\partial u}{\partial t}, \frac{\partial u}{\partial x}$, то такая система является линейной относительно указанных величин.

Если система дифференциальных уравнений в частных производных первого порядка (1) является квазилинейной, то она допускает запись в виде:

$$\sum_{k=1}^N a_{ik} \frac{\partial u_k}{\partial t} + \sum_{k=1}^N b_{ik} \frac{\partial u_k}{\partial x} = f_i, \quad i = 1 \div N, \quad (3)$$

где a_{ik}, b_{ik} зависят от независимых переменных t, x и решения $\bar{u}$.

В случае, если они не зависят от u , система называется полулинейной. Если же и f_i не зависит от решения системы, то она является линейной.

Можно представить систему (3) в матричной форме

$$D \frac{\partial u}{\partial t} + P \frac{\partial u}{\partial x} = f, \quad (4)$$

которая, в предположении, что матрица D неособенная, представляется в виде:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + A \frac{\partial u}{\partial x} = f. \quad (5)$$

Для случая, соответственно, трех или четырех независимых переменных, (5) имеет вид:

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} + A_1 \frac{\partial u_1}{\partial x_1} + A_2 \frac{\partial u_2}{\partial x_2} &= f, \\ \frac{\partial u}{\partial t} + A_1 \frac{\partial u_1}{\partial x_1} + A_2 \frac{\partial u_2}{\partial x_2} + A_3 \frac{\partial u_3}{\partial x_3} &= f, \end{aligned} \quad (6)$$

или же:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \sum_{k=1}^K A_k \frac{\partial u_k}{\partial x_k} = f, \quad \text{где } K = 2 \text{ либо } 3. \quad (7)$$

Системы уравнений гиперболического типа

В дальнейшем будет рассматриваться система квазилинейных уравнений в частных производных, записанная в нормальной форме для одномерного случая:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + A \frac{\partial u}{\partial x} = f. \quad (8)$$

Предполагая, что все собственные значения матрицы A вещественны и существует базис $\{\omega_i\}$ из собственных векторов, умножаем (8) на левый собственный вектор и

$$\omega_i \frac{\partial u}{\partial t} + \omega_i A \frac{\partial u}{\partial x} = \omega_i f, \quad (9)$$

или:

$$\omega_i \left(\frac{\partial u}{\partial t} + \lambda_i \frac{\partial u}{\partial x} \right) = \omega_i f. \quad (10)$$

При раскрытии в (10) скалярных произведений, получаем:

$$\sum_{i=1}^N \omega_i \left(\frac{\partial u_i}{\partial t} + \lambda_i \frac{\partial u_i}{\partial x} \right) = \sum \omega_i f_i. \quad (11)$$

Выражение в скобках может быть записано в виде:

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + \omega_i \frac{\partial u_i}{\partial x} = \left(\frac{\partial u_i}{\partial t} \right) \Big|_{\frac{dx}{dt} = \lambda_i}, \quad (12)$$

где $\frac{\partial u_i}{\partial t}$ является производной искомой функции $u_i(t, x)$ по направлению $\frac{dx}{dt} = \lambda_i$.

Таким образом, получаем линейную комбинацию производных $\left(\frac{du_i}{dt} \right)$.

Уравнение, определяемое обыкновенным дифференциальным уравнением вида:

$$\frac{dx}{dt} = \lambda_i \quad (13)$$

называется характеристическим.

В дальнейшем система уравнений в частных производных (8) будет называться гиперболической (или системой уравнений гиперболического типа) в некоторой односвязной области L , которой принадлежат величины t, x, u , если в любой точке L выполнены два условия:

- все соответственные значения $\lambda_k(t, x, u)$ матрицы $A(t, x, u)$ вещественны;
- в линейном векторном пространстве R_N существует ортонормированный базис $\{\omega_i\}_{i=1}^{i=N}$, составленный из левых собственных векторов матрицы A и удовлетворяющий условию:

$$\det \Omega = \det \{\omega_i^k\} = \det \begin{Bmatrix} \omega_1^1 \omega_2^1 & \dots & \omega_N^1 \\ - & - & - \\ \omega_1^N \omega_2^N & \dots & \omega_N^N \end{Bmatrix} = 0. \quad (14)$$

Иногда к приведенным условиям добавляется третье условие — на гладкость собственных значений векторов матрицы A (например, в определении Петровского приводится условие того, что λ_k и $\{\omega_i^k\}$ должны обладать той же гладкостью, что и элементы матрицы $A(t, x, u)$).

Рассматриваемая система уравнений в частных производных (8) называется гиперболической в узком смысле, если в любой точке L_N собственные значения матрицы $A\lambda_k (k = 1 \div N)$ вещественны и различны. Из определения гиперболичности системы следует эквивалентность двух систем уравнений:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + A \frac{\partial u}{\partial x} = f,$$

$$\omega^k \left(\frac{\partial u}{\partial t} + \lambda_k \frac{\partial u}{\partial x} \right) = \omega_k f_k.$$

Система (11) называется характеристической формой исходной системы уравнений (8).

Характеристическая форма рассматриваемой системы может быть также представлена в виде:

$$\omega^k \left(\frac{\partial u}{\partial t} \right) = f_k, \quad (15)$$

где $\left(\frac{\partial u}{\partial t} \right)_k = \frac{\partial u}{\partial t} + \lambda_k \frac{\partial u}{\partial x}$.

Если собственные значения и собственные векторы матрицы A в системе уравнений

$$\frac{\partial u}{\partial t} + A \frac{\partial u}{\partial x} = 0 \quad (16)$$

постоянны, то матрица A представлена в виде произведения:

$$A = \Omega^{-1} \Lambda \Omega, \quad (17)$$

где Λ — диагональная матрица, состоящая из собственных значений $\{\lambda_1, \dots, \lambda_N\}$ матрицы A , Ω — матрица, строками которой являются левые собственные векторы A .

При умножении (16) на Ω и вводе переменных Римана $v = \Omega u$ выводится новая система вида

$$\frac{\partial v}{\partial t} + \Lambda \frac{\partial v}{\partial x} = 0, \quad (18)$$

где $\Lambda = \text{diag} \{ \lambda_1, \dots, \lambda_N \}$, или в скалярном виде $\frac{\partial v_k}{\partial t} + \lambda_k \frac{\partial v_k}{\partial x} = 0$, $k = 1 \div N$.

Видно, что исходная система распадается на N отдельных скалярных уравнений переноса, решениями которых будут бегущие волны

$$v_k = v_k(x - \lambda_k t), \quad k = 1 \div N, \quad (19)$$

каждая из которых распространяется со скоростью λ_k , при этом сохраняя свою начальную форму.

Общим же решением системы является суперпозиция бегущих волн, распространяющихся с указанными скоростями:

$$\bar{v} = \sum_{k=1}^N \omega^k v_k(x - \lambda_k t). \quad (20)$$

Инварианты Римана

Если система собственных векторов ортонормирована, то значения ω^k можно интерпретировать как амплитуды бегущих волн. Функции ω^k называются инвариантами Римана, а система с (18) — системой в инвариантах.

Далее рассмотрено понятие инвариантов Римана на простом примере — акустической системы из двух скалярных уравнений в частных производных, описывающих распространение плоских звуковых волн:

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{1}{\rho_0} \cdot \frac{\partial p}{\partial x} = 0 \end{cases} \quad (21.1)$$

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} + \rho_0 c_0^2 \cdot \frac{\partial u}{\partial x} = 0, \end{cases} \quad (21.2)$$

где u — скорость сплошной среды, p — давление в среде; ρ_0 — ее плотность, c_0 — скорость распространения звука в среде.

Если оба этих уравнения проинтегрировать по произвольной области с границей G в плоскости $\{t, x\}$ и перейти к контурным интегралам, это приведет к интегральным уравнениям:

$$\begin{cases} \oint_G \rho_0 u dx - p dt = 0, \\ \oint_G \frac{\rho_0}{c_0} u dx - \rho_0 u dt = 0, \end{cases} \quad (22)$$

представляющим законы сохранения импульса и массы. В данном случае уравнение состояния имеет вид: $p = c_0^2(\rho - \rho_0)$.

При умножении (21.1) на $\rho_0 u$, а (21.2) на $p/(\rho_0 c_0^2)$ и их сложении, выводится тождество:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\rho_0 \frac{u^2}{2} + \frac{p^2}{2 \rho_0 c_0^2} \right) + \frac{\partial}{\partial x} (pu) = 0, \quad (23)$$

откуда следует, что для любого замкнутого контура справедлив закон сохранения энергии акустических волн:

$$\oint_G \left(\rho_0 \frac{u^2}{2} + \frac{p^2}{2 \rho_0 c_0^2} \right) dx - p u dt = 0. \quad (24)$$

Теперь нужно привести систему (21) к кинетическому виду. Для этого умножается второе уравнение на $(\rho_0 c_0)^{-1}$, затем складывается с первым и вычитается из него, после чего получается:

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t} \left(u + \frac{p}{\rho_0 c_0} \right) + c_0 \frac{\partial}{\partial x} \left(u + \frac{p}{\rho_0 c_0} \right) = 0, \\ \frac{\partial}{\partial t} \left(u - \frac{p}{\rho_0 c_0} \right) - c_0 \frac{\partial}{\partial x} \left(u - \frac{p}{\rho_0 c_0} \right) = 0. \end{cases} \quad (25)$$

$$\text{Введем обозначения} \quad R^+ = u + \frac{p}{\rho_0 c_0}, \quad R^- = u - \frac{p}{\rho_0 c_0}, \quad (26)$$

получим уравнения в инвариантах Римана ($R^\pm$ — инварианта Римана):

$$\frac{\partial R^+}{\partial t} + c_0 \frac{\partial R^+}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial R^-}{\partial t} - c_0 \frac{\partial R^-}{\partial x} = 0, \quad (27)$$

позволяющие выписать их общее решение:

$$R^+ = f(x - c_0 t), \quad R^- = g(x + c_0 t), \quad (28)$$

где f, g — функции, определяемые из условий задачи. Зная инварианты Римана, из (26) можно получить значения искомых функций:

$$\begin{cases} u = \frac{1}{2} [f(x - c_0 t) + g(x + c_0 t)], \\ p = \frac{\rho_0 c_0}{2} [f(x - c_0 t) - g(x + c_0 t)]. \end{cases}$$

Из соотношений (27) видно, что величины R^+, R^- остаются постоянными вдоль прямых $x_0 - c_0 t = \text{const}$ и $x_0 + c_0 t = \text{const}$, соответственно, и их графики перемещаются со временем вправо (влево) со скоростью c_0 .

Прямые

$$\frac{\partial x}{\partial t} = \pm c_0 \quad \text{или} \quad (29)$$

$$x \pm c_0 t = \text{const}$$

называются характеристиками системы (21), которой также необходимо добавить начальные условия:

$$u(x, 0) = u_0(x), \quad p(x, 0) = p_0(x), \quad (30)$$

откуда следует:

$$u(x) = \frac{1}{2} [f(x) + g(x)],$$

$$p_0(x) = \frac{\rho_0 c_0}{2} [f(x) - g(x)],$$

или

$$f(x) = u_0(x) + \frac{p_0(x)}{\rho_0 c_0},$$

$$g(x) = u_0(x) - \frac{p_0(x)}{\rho_0 c_0}.$$

В таком случае решение системы (21) с начальными данными (30) представляется в виде:

$$\begin{cases} u(t, x) = \frac{1}{2} [u_0(x - c_0 t) + u_0(x + c_0 t)] + \frac{1}{2 \rho_0 c_0} [p_0(x - c_0 t) - p_0(x + c_0 t)], \\ p(t, x) = \frac{1}{2} [p_0(x - c_0 t) + p_0(x + c_0 t)] + \frac{\rho_0 c_0}{2} [u_0(x - c_0 t) - u_0(x + c_0 t)]. \end{cases} \quad (31)$$

Пусть, например, начальные условия имеют следующий вид:

$$u_0(x) = u_1, \quad p_0(x) = p_1, \quad x < X, \quad (32)$$

$$u_0(x) = u_2, \quad p_0(x) = p_2, \quad x > X,$$

где $u_i, p_i (i = 1, 2)$ — постоянные, причем выполнено одно из равенств $u_1 \neq u_2$ или $p_1 \neq p_2$, либо оба одновременно.

Решение этой задачи, которое несложно получить, дается следующими соотношениями:

$$u = u_1, \quad p = p_1, \quad x < X - c_0 t,$$

$$u = u_2, \quad p = p_2, \quad x > X + c_0 t,$$

$$u = \frac{u_1 + u_2}{2} - \frac{p_1 + p_2}{2 \rho_0 c_0}, \quad (33)$$

$$p = \frac{p_1 + p_2}{2} - \rho_0 c_0 \frac{u_2 + u_1}{2}, \quad X - ct < x < X + ct.$$

Полученные решения $u(t, x), p(t, x)$ имеют разрывы вдоль прямых $x + c_0 t = X$ и $x - c_0 t = X$, которые образовались из начального разрыва в точке $x = X$. По этой причине рассмотренную задачу называют задачей о распаде разрыва.

Вообще говоря, эти функции формально нельзя считать решением данной задачи вследствие того, что они не являются непрерывными. По этой причине они называются обобщенным решением задачи о распаде разрыва.

Стоит отметить, что понятие инвариантов было введено Риманом в 1876 г.

Далее приведем более сложный пример — решение одномерной системы уравнений газодинамики:

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{1}{\rho} \cdot \frac{\partial p}{\partial x} = 0, \end{cases} \quad (34.1)$$

$$\begin{cases} \frac{\partial p}{\partial t} + u \frac{\partial p}{\partial x} + c^2 \cdot \rho \cdot \frac{\partial p}{\partial x} = 0, \end{cases} \quad (34.2)$$

где u , ρ — скорость и плотность газа; p — давление в газе, c — скорость звука газа, t , x — время и координата.

Уравнение (27б) умножается на $(\rho c)^{-1}$ и складывается с (27а). Получается:

$$\left[\frac{\partial u}{\partial t} + (u + c) \frac{\partial u}{\partial x} \right] + \frac{1}{\rho c} \left[\frac{\partial p}{\partial t} + (u + c) \frac{\partial p}{\partial x} \right] = 0, \quad (35)$$

или

$$\left(\frac{\partial u}{\partial t} \right)^+ + \frac{1}{\rho c} \left(\frac{\partial p}{\partial t} \right)^+ = 0, \quad (36)$$

где $\left(\frac{\partial u}{\partial t} \right)^+$ — производная по направлению $\frac{\partial u}{\partial t} = (u + c)$.

Аналогично проводятся выкладки с заменой c на $(-c)$, после чего квазилинейная система уравнений приводится к характеристической форме:

$$\begin{cases} \left(\frac{\partial S}{\partial t} \right)^0 = 0, \\ \left(\frac{\partial u}{\partial t} \right)^+ + \frac{1}{\rho c} \left(\frac{\partial p}{\partial t} \right)^+ = 0, \\ \left(\frac{\partial u}{\partial t} \right)^- + \frac{1}{\rho c} \left(\frac{\partial p}{\partial t} \right)^- = 0, \end{cases} \quad (37)$$

где $\left(\frac{\partial}{\partial t} \right)^0 = \frac{\partial}{\partial t} + u \frac{\partial}{\partial x}$,

а уравнение (30) выражает закон сохранения энтропии вдоль траектории частицы, т. е. на траектории, описываемой обыкновенным уравнением вида:

$$\frac{\partial X}{\partial t} = u(t, X), \quad X(0) = X_0,$$

где функция $X(t)$ — траектория частицы.

В случае изэнтропического течения, т. е. при

$$p = A \rho^\gamma (A = \text{const}) \quad (38)$$

и, соответственно,

$$c^2 = A \gamma \rho^{\gamma-1}, \quad \left(c = \sqrt{\frac{\partial p}{\partial \rho}} \right),$$

выражение $\frac{\partial p}{\partial c}$ становится дифференциальным:

$$\frac{1}{\rho c} dp = \frac{2}{\gamma - 1} dc.$$

Тогда, после внесения множителя $(\rho c)^{-1}$ под знак дифференцирования полученных уравнений, получается:

$$\begin{cases} \frac{\partial S}{\partial t} + u \frac{\partial S}{\partial x} = 0, \\ \frac{\partial R^+}{\partial t} + (u + c) \frac{\partial R^+}{\partial x} = 0, \\ \frac{\partial R^-}{\partial t} + (u - c) \frac{\partial R^-}{\partial x} = 0, \end{cases} \quad (39)$$

$$\text{или} \quad \begin{cases} \left(\frac{\partial S}{\partial t} \right)^0 = 0, \\ \left(\frac{\partial R^+}{\partial t} \right) = 0, \\ \left(\frac{\partial R^-}{\partial t} \right) = 0, \end{cases} \quad (40)$$

$$\text{где } R^+ = u + \frac{2c}{\gamma - 1}, \quad R^- = u - \frac{2c}{\gamma - 1} \quad (41)$$

инварианты Римана для одномерной квазилинейной системы уравнений газодинамики, сохраняющие свои значения на траекториях уравнений,

$$\frac{\partial X^\pm}{\partial t} = u \pm c. \quad (42)$$

Очевидно, что через значения инвариантов Римана и энтропии, которые находятся из решений обыкновенных дифференциальных уравнений, вычисляются остальные функции (u, p, ρ) , описывающие течение газа. Однако u, c — сами функции $S, R^\pm$, поэтому решение этих уравнений в квадратурах, в произвольном случае, найти невозможно. Тем не менее, точное решение находится в частном случае для $\gamma = 3$ (продукты детонации).

Так как в этом случае $R^\pm = u \pm c$, то траектории $X^\pm(t, X_0^\pm)$ — есть семейства прямых с постоянными наклоном.

Характеристическая форма уравнений газовой динамики позволяет понять, как правильно ставить граничные условия. Для примера рассмотрена левая граница области интегрирования. Через любую ее точку проходят три характеристики с наклонами $u, (u + c), (u - c)$. Те из них, наклоны которых положительны, называют входящими в область интегрирования. Таким образом, левой границе необходимо задать столько условий, сколько характеристик входит в область; аналогично — на правой границе.

Список литературы

1. Рождественский, Б. Л. Системы квазилинейных уравнений / Б. Л. Рождественский, Н. Н. Яненко. — Москва : Наука: Физматлит, 1978. — 687 с.
2. Численное решение многомерных задач газовой динамики / С. К. Годунов, А. В. Забродин, М. Я. Иванов, [и др.]. — Москва : Наука: Физматлит, 1973. — 400 с.
3. Годунов, С. К. Разностные схемы. Введение в теорию / С. К. Годунов, В. С. Рябенский. — Москва : Наука: Физматлит, 1973. — 400 с.
4. Олдер, Б. Вычислительные методы в гидродинамике / Б. Олдер, С. Фернбах / под ред. М. Ротенберга. — Москва : Мир, 1967. — 383 с.
5. Самарский, А. А. Теория разностных схем / А. А. Самарский. — Москва : Наука: Физматлит, 1977. — 653 с.
6. Шокин, Ю. И. Метод дифференциального приближения. Применение к газовой динамике / Ю. И. Шокин, Н. Н. Яненко. — Новосибирск : Наука, 1985. — 364 с.
7. Белоцерковский, О. М. Численное моделирование в механике сплошных сред / О. М. Белоцерковский. — Москва : Физматлит, 1994. — 442 с.
8. Самарский, А. А. Разностные методы решения задач газовой динамики / А. А. Самарский, Ю. П. Попов. — Москва : USSR, 2009. — 421 с.
9. Магомедов, К. М. Сеточно-характеристические численные схемы / К. М. Магомедов, А. С. Холодов. — Москва : Наука, 1988. — 288 с.
10. Федоренко, Ф. П. Введение в вычислительную физику / Ф. П. Федоренко. — Долгопрудный : Интеллект, 2008. — 503 с.
11. Куликовский, А. Г. Математические решения гиперболических систем уравнений / А. Г. Куликовский, Н. В. Погорелов, А. Ю. Семенов. — Москва : Физматлит, 2012. — 656 с.
12. Петров, И. Б. Лекции по вычислительной математике / И. Б. Петров, А. И. Лобанов. — Москва: Бином, 2010. — 522 с.

13. Кукуджанов, В. Н. Вычислительная механика сплошных сред / В. Н. Кукуджанов. — Москва : Физматлит, 2008. — 320 с.
14. Riemann, B. Über die Fortpflanzung ebener Luftwellen von endlicher Schwingungsweite / B. Riemann // Abhndl. Von der Konglichen Gesellschaft der Wissenschaften zu Gottingen, Mathem. Klass. — 1860. — Vol. 8. — P. 43–45.
15. Русанов, В. В. Метод характеристик для пространственных задач. Теоретическая гидродинамика / В. В. Русанов / под ред. Л. И. Седова // Труды Министерства авиационной промышленности СССР. — Москва : Оборонгиз, 1953. — Вып. 3, № 11. — С. 3–62.
16. Richardson, D. J. The solution of two-dimensional hydrodynamic equation by the method of characteristic. In Method of Computational Physics 3 / D. J. Richardson // Academic Press : New York, 1964. — P. 295–318.
17. Жуков, А. И. Применение метода характеристик к численному решению одномерных задач газовой динамики / А. И. Жуков // Труды Математического института им. В. А. Стеклова. — АН СССР. — 1958. — С. 1–152.
18. Courant, R. On the solution of nonlinear hyperbolic differential equation by finite differences. Comm. Pure and Appl / R. Courant, E. Isakson, M. Rees // Math. — 1952. — Vol. 5, no. 5. — P. 243–254.
19. Холодов, А. С. О построении разностных схем повышенного порядка точности для уравнений гиперболического типа / А. С. Холодов // Журнал вычислительной и математической физики. — 1980. — Т. 20, № 6. — С. 1601–1620.
20. Петров, И. Б. О регуляризации разрывных численных решений уравнений гиперболического типа / И. Б. Петров, А. С. Холодов // Журнал вычислительной и математической физики. — 1984. — Т. 24, № 8. — С. 1172–1188.
21. Favorskaya, A. V. Innovation in Wave Processes Modeling and Decision Making. Gricharacteristic Method and Applications / A. V. Favorskaya, I. B. Petrov // Springer. — 2018. — 251 p.
22. Холодов, А. С. О критерии монотонности разностных схем для уравнений гиперболического типа / А. С. Холодов, Я. А. Холодов // Журнал вычислительной и математической физики. — 2006. — Т. 46, № 9. — С. 1638–1667.
23. Lax, P. D. Weak solution of nonlinear hyperbolic equation and their numerical computation / P. D. Lax // Communications on Pure and Applied Mathematics. — 1954. — Vol. 7, no. 1. — P. 159–193.
24. Ландау, Л. Д. Численные методы интегрирования уравнений в частных производных методом сеток / Л. Д. Ландау, И. Н. Мейман, И. М. Халатников // Труды III Всесоюзного Математического съезда. — Изд. АН СССР. — Т. 3. — С. 92–100.
25. Lax, P. D. System of conservation law / P. D. Lax, B. Wendroff // Communications on Applied Mathematics. — 1960. — Vol. 13, no. 2. — P. 217–237.
26. MacCormack, R.W. The effect of viscosity in hypervelocity impact cratering / R. W. MacCormack // AIAA Paper. — 1969. — No. 69. — 354 p.
27. Kutler, P. Second and third-order noncentered difference schemes for nonlinear hyperbolic equation / P. Kutler, H. Lomax, R.F. Warming // AIAA Paper. — 1973. — No. 11. — P. 189–196.
28. Федоренко, Р. П. Применение разностных схем высокой точности для численного решения гиперболических уравнений / Р. П. Федоренко // Журнал вычислительной математики математической физики. — 1962. — Т. 2, № 6. — С. 1122–1128.
29. Русанов, В. В. Разностные схемы третьего порядка точности для сквозного счета разрывных решений / В. В. Русанов // Доклады АН СССР, 180. — 1968. — № 6. — С. 1303–1305.
30. Burstein, S. Z. Third order difference method for hyperbolic equations / S. Z. Burstein, A. A. Mirin // Journal of Computational Physics. — 1970. — Vol. 5, no. 3. — P. 547–571.
31. Толстых, А. И. О построении схем заданного порядка с линейными комбинациями операторов / А. И. Толстых // Журнал вычислительной математики и математической физики. — 2000. — Т. 2, № 6. — С. 1122–1128.
32. Рогов, В. В. Монотонные бикомпактные схемы для линейного уравнения переноса / В. В. Рогов, М. Н. Михайловская // Математическое моделирование. — 2011. — Т. 23, № 6. — С. 98–110.
33. Schwarzkopff, T. A. A high-order Approach for Linear Hyperbolic Systems in 2D / T. A. Schwarzkopff, C. D. Munz and Toro // Journal of Scientific Computing. — 2002. — Vol. 17, no. 3. — P. 231–240.

34. Сеточно-характеристический метод с использованием интерполяции высоких порядков на тетраэдральных иерархических сетках с кратным шагом по времени / И. Б. Петров, А. В. Фаворская, А. В. Санников, И. Е. Квасов // Математическое моделирование. — 2013. — Т. 25, № 2. — С. 42–52.
35. Петров, И. Б. Моделирование задач 3D сейсмологии на высокопроизводительных вычислительных системах / И. Б. Петров, Н. И. Хохлов // Журнал вычислительной математики и математической физики. — 2014 г. — Т. 26, № 1. — С. 83–95.
36. Van Neumann J. A method for the numerical calculation of hydrodynamic shocks / J. Van Neumann, R. D. Richtmyer // Journal of Applied Physics. — 1950. — Vol. 21, no. 3. — P. 232–237.
37. Куропатенко, В. Д. Метод построения разностных схем для численного интегрирования уравнений гидродинамики / В. Д. Куропатенко // Известия Высших учебных заведений. Серия «Математика» — 1962. — № 3. — С. 75–83.
38. Richtmyer, R. D. Difference Methods for Initial-Value Problems / R. D. Richtmyer, K. W. Morton // Inter-science Publishers. — 1967. — 418 p.
39. Wilkins, M. L. Use of artificial viscosity on multidimensional fluid dynamic calculation / M. L. Wilkins // Journal of Computational Physics. — 1980. — Vol. 36, no. 3. — P. 281–303.
40. Roache, P. J. Computational Fluid Dynamics / P. J. Roache // Numerical, Albuquerque, NM. — 1976.
41. Friedrichs, K. O. Symmetric hyperbolic linear differential equations / K. O. Friedrichs // IBID. — 1954. — No. 2. — P. 345–392.
42. Годунов, С. К. Разностный метод численного расчета разрывных уравнений гидродинамики / С. К. Годунов // Математический сборник. — 1959. — Т. 47 (89), вып. 3. — С. 271–306.
43. Harten, A. High resolution schemes for hyperbolic conservation laws / A. Harten // Journal Comp. Phys. — 1983. — Vol. 49, no. 3. — P. 357–393.
44. Boris, I. P. Flux-corrected transport. I. Shasta a fluid transport algorithm that works / I. P. Boris, D. L. Book // Journal of Computational Physics. — 1973. — Vol. 11, no. 1. — P. 38–69.
45. Van Leer. Towards the Ultimate Conservative Difference Scheme / Van Leer // Journal of Computational Physics. — Vol. 14, no. 4. — P. 361–370.
46. Яненко, Н. Н. Дифференциальные анализаторы ударных волн / Н. Н. Яненко, Е. В. Ворожцов, В. М. Фомин // Доклады АН СССР, 227. — 1976. — № 1. — С. 50–53.
47. Гольдин, В. Я. Нелинейные разностные схемы для гиперболических уравнений / В. Я. Гольдин, Н. Н. Калиткин, Т. В. Шишова // Журнал вычислительной математики и математической физики. — 1965. — № 5. — С. 938–944.
48. Harten, A. Switched numerical shuman filters for shock calculation / A. Harten, G. Zwas // Journal of Engineering Mathematics. — 1972. — Vol. 6, no. 2. — P. 207–216.
49. Van Leer B. Towards the ultimate conservative difference scheme / Van Leer B. // The quest of Monotonicity. Lecture Notes in Physics. — 1973. — Vol. 18, no. 1. — P. 163–168.
50. Van Leer B. Towards the ultimate conservative difference scheme / Van Leer B. // The quest of Monotonicity. Lecture Notes in Physics. — 1973. — Vol. 14, no. 4. — P. 361–370.
51. Колган, В. П. Применение принципа минимальных значений производных к построению конечно-разностных схем для расчета разрывных численных решений газовой динамики / В. П. Колган // Ученые записки ЦАГИ. — 1972. — Т. 3, № 6. — С. 68–77.
52. Sweby, P. K. High resolution schemes using flux limiters for hyperbolic conservation laws / P. K. Sweby // Journal on Numerical Analysis. — 1984. — Vol. 21, no. 5. — P. 995–1011.
53. Harten, A. ENO schemes with subcell resolution / A. Harten // Journal of Computational Physics. — 1989. — Vol. 83, no. 1. — P. 148–184.
54. Shu, C.-W. TVB uniformly high-order accurate nonoscillatory schemes. / C.-W. Shu // Journal on Numerical Analysis. — SIAM, 1987. — Vol. 24, no. 2. — P. 279–309.
55. Liu, X.-D. Weighted essentially non-oscillatory schemes / X.-D. Liu, S. Osher, T. Chan // Journal of Computational Physics. — 1994. — Vol. 115, no. 1. — P. 200–212.
56. Toro, E. F. A fast Riemann solver with constant covolume applied to the random choice method / E. F. Toro // International Journal Numer. Meth. Fluids. — 1989. — No. 9. — P. 1145–1164.

57. Toro, E. F. *Riemann Solvers and Numerical methods for Fluid Dynamics* / E. F. Toro // *A practical Introduction*. — Berlin : Springer, 1997.
58. Толстых, А. И. Компактные и мультиоператорные аппроксимации высокой точности для уравнений в частных производных / А. И. Толстых. — Москва : Наука, 2015. — 349 с.
59. Петров, И. Б. Численное исследование некоторых динамических задач механики деформируемого твердого тела сеточно-характеристическим методом / И. Б. Петров, А. С. Холодов // *Журнал вычислительной математики и математической физики*. — 1984. — Т. 24, № 5. — С. 722–739.
60. Азаренок, Б. Н. О применении адаптивных сеток для численного решения нестационарных задач газовой динамики / Б. Н. Азаренок, С. А. Иваненко // *Журнал вычислительной математики и математической физики*. — 2000. — Т. 40. — С. 1386–1407.
61. Лисейкин, В. Д. Разностные сетки. Теория и приложения / В. Д. Лисейкин. — Новосибирск : Изд. Сибирского отд. РАН, 2014. — 253 с.
62. Автоматизированные технологии расчетных сеток. Нелинейная вычислительная механика прочности / Ю. В. Василевский, А. А. Данилов, К. Н. Липников, В. Н. Чугунов. — Москва : Физматлит, 2016. — Т. IV. — 211 с.
63. Харлоу, Ф. Х. Численный метод «частиц» в ячейках для задач гидродинамики / Ф. Х. Харлоу / под ред. С. С. Григоряна и Ю. Д. Шмыглевского. — Москва : Мир. — 383 с.
64. Белоцерковский, О. М. Метод крупных частиц в газовой динамике / О. М. Белоцерковский, Ю. М. Давыдов. — Москва : Наука, 1982. — 392 с.
65. Григорьев, Ю. Н. Численное моделирование методами частиц — в ячейках / Ю. Н. Григорьев, В. А. Вшивков, М. П. Федорчук. — Новосибирск : Изд. Сибирского отд., 2004. — 359 с.
66. Monagan, J. J. An introduction to SPH / J. J. Monagan // *Computer Physics Communications*. — 1988. — Vol. 48. — P. 89–96.
67. Потапов, А. П. Моделирование волновых процессов методом сглаженных частиц / А. П. Потапов, С. И. Ройз, И. Б. Петров // *Математическое моделирование*. — 2009. — Т. 21, № 7. — С. 20–28.
68. О сеточно-характеристическом методе на неструктурированных сетках / И. Б. Петров, А. В. Фаворская, М. В. Муратов, В. А. Бирюков, А. В. Санников // *Доклады Академии Наук*. — 2014. — Т. 459, № 4. — С. 406–408.
69. О комбинированном методе для численного решения динамических пространственных упругопластических задач / И. Б. Петров [и др.] // *Доклады Академии Наук*. — 2014. — Т. 460, № 4. — С. 389–391.
70. Рогов, Б. В. Высокоточная монотонная компактная схема бегущего счета для многомерных уравнений гиперболического типа / Б. В. Рогов // *Журнал вычислительной математики и математической физики*. — 2013. — Т. 53, № 4. — С. 94–104.
71. Холодов, А. С. Численные методы решения уравнений и систем гиперболических уравнений / А. С. Холодов. Москва : Янус-К, 2008 г. — Т. 8–1, ч. 2. — С. 141–174.
72. Голубев, В. И. Компактные сеточно-характеристические схемы повышенного порядка точности для трехмерного линейного уравнения переноса / В. И. Голубев, И. Б. Петров, Н. И. Холодов // *Математическое моделирование*. — 2016. — Т. 28, № 2. — С. 123–132.
73. Local discontinuous Galerkin method for contaminant transport / V. Aizinger, C. Dawson, D. Cockburn and P. Castillo // *Advances in Water Resources*. — 2000. — Vol. 24. — P. 73–78.
74. Миряха, В. А. Численное моделирование динамических процессов в твердых деформируемых телах разрывным методом Галеркина / В. А. Миряха, А. В. Санников, И. Б. Петров // *Математическое моделирование*. — 2015. — Т. 27, № 3. — С. 96–108.
75. Батэ, К.-Ю. Методы конечных элементов / К.-Ю. Батэ. — Москва : Физматлит, 2010. — 1022 с.
76. Golovizin, V. N. Some properties of the CABARET scheme / V. N. Golovizin, A. A. Samarskii // *Mathematical Models*. — 1998. — No. 10. — P. 101–116.
77. Randall J., Leveque. *Finite Volume Methods for Hyperbolic Problems* / Randall J., Leveque // *Cambridge texts in applied mathematics*. — Cambridge University press, 2002. — 558 p.
78. Лунев, В. В. Течение реальных газов с большими скоростями / В. В. Лунев. — Москва : Физматлит, 2007.
79. Любимов, А. Н. Течение газа около тупых тел / А. Н. Любимов, В. В. Русанов. В 2-х ч. — Москва : Наука, 1970 г.

80. Utyzhnikov, S. Hypersonic aerodynamics and heat Transfer / S. Utyzhnikov, G. Tirskiy // Begell. — New York : Connecticut. — 536 p.
81. О численном решении связанных задач сверхзвукового обтекания деформируемых оболочек / П. Н. Коротин, И. Б. Петров, В. Б. Пирогов, А. С. Холодов // Журнал вычислительной математики и математической физики. — 1987. — Т. 27, № 8. — С. 1233–1243.
82. Максимов, Ф. А. Сверхзвуковое обтекание системы тел / Ф. А. Максимов // Компьютерные исследования и моделирование. — 2013. — Т. 5, № 6. — С. 969–980.
83. Ведерников, А. Е. Численное исследование двух и трехслойной жидкости в приближении мелкой воды / А. Е. Ведерников, А. С. Холодов // Математическое моделирование. — 1990. — Т. 2, № 6. — С. 9–18.
84. Холодов, А. С. Вычислительные модели верхней атмосферы Земли и некоторые их приложения / А. С. Холодов, М. О. Васильев, Е. А. Молоков / Известия РАН // серия «Физика атмосферы и океана». — 2010. — Т. 46, № 6. — С. 1–21.
85. Крысанов, Б. Ю. Моделирование МГД — уравнениями ионосферных возмущений, генерируемых в приземном слое атмосферы / Б. Ю. Крысанов, В. Е. Куницын, А. С. Холодов // Журнал вычислительной математики и математической физики. — 2011. — Т. 51, № 2. — С. 282–302.
86. Astanin, A. V. Modeling the Influence Bow Shock Wave on the Earth's Surface / A. V. Astanin, A. D. Dashkevich, M. N. Petrov [et al.] // Mathematical Models and Computer Simulation. — 2017. — Vol. 9, no. 2. — P. 133–141.
87. Петров, И. Б. Численное исследование волновых процессов и процессов разрушения в многослойных преградах / И. Б. Петров, Ф. Б. Челноков // Журнал вычислительной математики и математической физики. — 2003. — № 43 (10). — С. 1562–1579.
88. Численное моделирование динамических процессов при низкоскоростном ударе по композитной стрингеровой панели. / И. Б. Петров [и др.] // Математическое моделирование. — 2014. — № 26 (9). — С. 96–110.
89. Моделирование экспериментов по исследованию прочностных характеристик льда разрывным методом Галеркина / В. А. Миряха, А. В. Санников, В. А. Бирюков, И. Б. Петров // Математическое моделирование. — 2018. — № 2.
90. Иванов, В. Д. Моделирование деформаций в мишенях под действием лазерного излучения / В. Д. Иванов, И. Б. Петров // Труды ИОФ АН СССР. — 1992. — Т. 36. — С. 247–265.
91. Коротин, П. Н. Численное моделирование поведения упругих и упругопластических тел под воздействием мощных энергетических потоков / П. Н. Коротин, И. Б. Петров, А. С. Холодов // Математическое моделирование. — 1989. — № 1 (7). — С. 1–12.
92. Острик, А. В. Расчет дифракции акустического импульса малой длительности на отверстии сложной формы в заполнителе, окруженном упругой оболочкой / А. В. Острик, И. Б. Петров, В. П. Петровский. — ДАН СССР, 1990. — № 2 (8). — С. 51–59.
93. Левянт, В. Б. Исследование характеристик продольных и обменных волн отклика обратного рассеяния от зон трещиноватости коллектора / В. Б. Левянт, И. Б. Петров, С. А. Панкратов // Технологии сейсморазведки. — 2009. — № 6 (2). — С. 3–11.
94. Муратов, М. В. Расчет волновых откликов от систем субвертикальных макротрещин с использованием сеточно-характеристического метода / М. В. Муратов, И. Б. Петров // Математическое моделирование. — 2013. — № 25 (3). — С. 89–104.
95. Фаворская, А. В. Сеточно-характеристический метод на системах вложенных иерархических сеток и его применение для исследования сейсмических волн / А. В. Фаворская, Н. И. Хохлов, И. Б. Петров // Журнал вычислительной математики и математической физики. — 2017. — Т. 57, № 11. — С. 1804–1811.
96. Голубев, В. И. Моделирование динамических процессов в трехмерных слоистых трещиноватых средах с использованием сеточно-характеристического численного метода / В. И. Голубев [и др.] // Прикладная механика и техническая физика. — 2017. — Т. 58, № 3. — С. 190–197.
97. Simulation of seismic processes in geological exploration of Arctic shelf / P. V. Stognii, I. B. Petrov, N. I. Kholodov, D. I. Petrov // Russian Journal numerical analysis and mathematical modelling. — 2017. — Vol. 32, No. 6. — P. 381–392.

98. Numerical modeling of earthquake on engineering structure on Arctic shelf / V. I. Golubev, A. V. Vasyukov, K. A. Beclemisheva, I. B. Petrov // Computational Mathematics and Information Technologies. — 2017. — No. 2. — P. 1–6.
99. Numerical solution of seismic exploration problems in the Arctic region by applying the grid-characteristic method / D. I. Petrov, I. B. Petrov, A. V. Favorskaya and N. I. Kholodov // Computational Mathematics and Mathematical Physics. — 2016. — Vol. 56, no. 6. — P. 1128–1141.
100. Мониторинг состояния подвижного состава с помощью высокопроизводительных методов / И. Б. Петров [и др.] // Математическое моделирование. — 2014. — Т. 26, № 7. — С. 19–32.
101. Голубев, В. И. Моделирование волновых процессов планеты с помощью гибридного сеточно-характеристического метода / В. И. Голубев, И. Б. Петров, Н. И. Хохлов // Математическое моделирование. — 2015. — Т. 27, № 2. — С. 139–148.
102. Allen Taflove, Susan C. Hagness. Computation electrodynamics. The finite-difference time-domation method / Allen Taflove, Susan C. Hagness // Artech House: Boston/London. — 2005. — P. 1006.
103. Численное решение системы уравнений Максвелла для моделирования распространения электромагнитных волн // Труды МФТИ. — 2016. — Т. 8. — С. 121–130.
104. Агапов, П. И. Численное моделирование последствий механического воздействия на мозг человека при черепно-мозговой травме / П. И. Агапов, О. М. Белоцерковский, И. Б. Петров // Журнал вычислительной математики и математической физики. — 2006. — Т. 46, № 9. — С. 1711–1720.
105. Балановский, Н. Н. Расчет динамических процессов в глазу при лазерной экстракции катаракты / Н. Н. Балановский, А. В. Бубнов, А. С. Обухов, И. Б. Петров // Математическое моделирование. — 2003. — № 15 (11). — С. 37–44.
106. Холодов, А. С. Математическое моделирование ирригационно-аспирационной техники фактоэмульсификации / А. С. Холодов, А. В. Бубнов, Т. Е. Марченкова // Офтальмохирургия. — 1991. — № 1. — С. 11–15.
107. Холодов, А. С. Численный анализ воздействия акустических возмущений на функцию легких и гемодинамику малого круга кровообращения / А. С. Холодов, С. С. Симаков // Медицина в зеркале информатики / под ред. О. М. Белоцерковского, А. С. Холодова. — Москва : Наука, 2008. — С. 45–75.
108. Холодов, А. С. Численное исследование транспортных потоков на основе гидродинамических моделей / А. С. Холодов [и др.] // Компьютерные исследования и моделирование. — 2011. — Т. 3, № 4. — С. 389–412.
109. Моделирование глобальных энергетических сетей / А. К. Бордонос, Я. А. Холодов, А. С. Холодов, И. И. Морозов // Математическое моделирование. — 2009. — Т. 21, № 6. — С. 3–16.
110. Северов, Д. С. Сравнение пакетной и потоковой моделей IP-сетей / Д. С. Северов, А. С. Холодов, Я. А. Холодов // Математическое моделирование. — 2011. — Т. 23, № 12. — С. 105–116.

Поступила в редакцию 24.01.2023.

Поступила после рецензирования 27.02.2023.

Принята к публикации 28.02.2023.

Об авторе:

Петров Игорь Борисович, член-корреспондент РАН, доктор физико-математических наук, профессор, Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет) (РФ, 141701, Московская область, г. Долгопрудный, Институтский переулок, 9), Math-Net.ru, MathsciNet, eLibrary.ru, ORCID, ResearchGate, petrov@mipt.ru

Автор прочитал и одобрил окончательный вариант рукописи.

УДК 519.6

Научная статья

<https://doi.org/10.23947/2587-8999-2023-6-1-22-26>**Об аналитическом решении для модели рекламы двух конкурирующих фирм**А. И. Сухинов  

Донской государственный технический университет, Российская Федерация, г. Ростов-на-Дону, пл. Гагарина, 1

 sukhinov@gmail.com**Аннотация**

Введение. Критерием успешности рекламной кампании является максимальное извлечение прибыли от продаж с учетом затрат на ее проведение, при этом реализация однотипных товаров происходит в конкурентной обстановке. В работе исследуется модель прогнозирования массовых продаж двух однотипных товаров в зависимости от тактики рекламной кампании. Рассматривается, в первую очередь, распределение средств между отдельными видами рекламы: расходы на рекламную бумажную продукцию, баннеры, реклама в электронных средствах массовой информации (ЭСМИ).

Материалы и методы. Используется модель в виде задачи Коши для системы из двух обыкновенных дифференциальных уравнений с нелинейными правыми частями, учитывающими: общее число потенциальных платежеспособных покупателей первого и второго товаров; интенсивность рекламной кампании, в основном, посредством ЭСМИ; положительное влияние на продажи взаимодействия уже купивших первый или второй вид товара с потенциальными покупателями, а также неформальную (на уровне покупателей) антирекламу.

Результаты исследования. Получено решение для случая постоянных коэффициентов, определяемых указанными выше факторами, для соответствующей задачи Коши в замкнутом виде.

Обсуждение и заключения. Полученные результаты могут быть использованы для «проигрывания» модельных ситуаций организации рекламы с целью определения условий извлечения наибольшей прибыли от продаж за вычетом расходов на рекламу.

Ключевые слова: модель прогнозирования продаж, задача Коши, расходы на рекламу, рекламная кампания, основные виды рекламы, продажи конкурирующих товаров.

Для цитирования. Сухинов, А. И. Об аналитическом решении для модели рекламы двух конкурирующих фирм / А. И. Сухинов // Computational Mathematics and Information Technologies. — 2023. — Т. 6, № 1. — С. 22–26.

<https://doi.org/10.23947/2587-8999-2023-6-1-22-26>

Original article

About the analytical solution for the advertising model of two competing firmsА. И. Sukhinov  

Don State Technical University, 1, Gagarin Square, Rostov-on-Don, Russian Federation

 sukhinov@gmail.com**Abstract**

Introduction. The criterion for the success of an advertising campaign is the maximum profit from sales, taking into account the costs of its implementation, while the sale of the same type of goods is sales occur in a competitive environment. The article examines a model for predicting mass sales of two similar products depending on the tactics of an advertising campaign. First of all, the distribution of funds between its separate types is considered: expenses for advertising paper products, banners and advertising in electronic media (EMM).

Materials and methods. The model is formulated in the form of a Cauchy problem for a system of two ordinary differential equations with nonlinear right-hand sides, taking into account: the total number of potential solvent buyers of the first and second goods; the intensity of the advertising campaign, mainly through EMM, the positive impact on sales of the interaction of those who have already bought the first or second type of goods with potential buyers, as well as informal (at the level of buyers) anti-advertising.

The results of the study. A solution is given for the case of constant coefficients determined by the above factors for the corresponding Cauchy problem in closed form.

Discussion and conclusions. The results obtained can be used to replay model situations of advertising organization in order to determine the conditions for extracting the greatest profit from sales minus advertising costs.

Keywords: sales forecasting model, Cauchy problem, advertising costs, advertising campaign, advertising main types, competing products sales.

For citation. Sukhinov, A. I. About the analytical solution for the advertising model of two competing firms / A. I. Sukhinov // Computational Mathematics and Information Technology. — 2023. — Vol. 6, no. 1. — P. 22–26. <https://doi.org/10.23947/2587-8999-2023-6-1-22-26>

Введение. С развитием новых электронных коммуникационных технологий лозунг «реклама — двигатель торговли» становится все более актуальным. На заре рекламных технологий основным источником рекламы являлась печатная продукция: буклеты и проспекты, статьи в газетах и журналах, плакаты и др. С появлением радио и телевидения возможности рекламы существенно возросли и, соответственно, значительно увеличились и затраты на нее. На современном этапе реклама стала неотъемлемой частью интернет-пространства. Она внедрилась во все социальные сети и, благодаря компьютерным и мультимедийным технологиям, превратилась во всепроникающую электронную цифровую среду (далее — электронные средства массовой информации). Если раньше издержки на рекламу могли составлять небольшую долю от себестоимости товара или услуги, то в настоящее время они доходят до 30 и более процентов от стоимости реализованных товаров и услуг. Прогнозирование продаж — весьма важный вопрос, который обусловлен тактикой рекламной кампании и распределением расходов между отдельными ее видами. Кроме того, важно принимать своевременное решение и о моменте прекращения рекламы, в особенности наиболее дорогостоящих ее видов, например, демонстрации рекламных роликов на центральных телевизионных каналах в прайм-тайм режиме. Основным критерий успешности рекламной кампании — извлечение максимальной прибыли от продаж с учетом затрат на ее проведение. Важным фактором последующей реализации однотипных, долговременно используемых товаров (например, iPhone), является формирование высокой потребительской репутации на продажах предыдущих поколений товаров. Их популярность определяется более высоким количеством проданных изделий и неформальной оценкой товара или услуги в среде покупателей. Как правило, продажи происходят в конкурентной обстановке и этот факт также подлежит учету. В настоящей работе предложена динамическая модель рекламной кампании при продажах двух конкурирующих однотипных товаров в виде задачи Коши (с начальными данными) для дифференциальных уравнений первого порядка с нелинейными правыми частями, которые учитывают основные виды рекламы и потенциальную емкость рынка. При некоторых упрощающих предположениях в замкнутом виде получено решение данной задачи, которая ранее для продаж одного вида товара неоднократно рассматривалась [1, 2] и приводила к решениям в виде логистических функций. Следует отметить, что данную модель можно развить и применять в других сферах деятельности, где идет конкурентная информационная борьба (выборы, формирование общественного мнения и т. д. [3, 4].

Материалы и методы. Дифференциальные уравнения, описывающие скорость изменения со временем числа покупателей, узнавших о товарах и купивших их, имеют вид:

$$\frac{dN_1}{dt} = [\alpha_{11}(t) + \alpha_{12}(t) \times N_1(t) - \alpha_{22}(t) \times N_2(t)] \times (N_0 - N_1 - N_2), \quad (1)$$

$$\frac{dN_2}{dt} = [\alpha_{21}(t) + \alpha_{22}(t) \times N_2(t) - \alpha_{12}(t) \times N_1(t)] \times (N_0 - N_1 - N_2), \quad (2)$$

$$t > 0,$$

$$N_1(0) = N_{10}, \quad N_2(0) = N_{20}, \quad t = 0, \quad (3)$$

где t — время, прошедшее с начала рекламной кампании; $N_1(t)$ и $N_2(t)$ — число покупателей первого и второго товара, соответственно; N_0 — общее число потенциальных платежеспособных покупателей первого и второго

товара; $\alpha_{11}(t)$ и $\alpha_{21}(t)$ характеризует интенсивность рекламной кампании (в основном посредством ЭСМИ) первого и второго товара; $\alpha_{12}(t)$ характеризует положительный результат взаимодействия уже купивших первый товар с потенциальными покупателями; аналогичный смысл имеет коэффициент $\alpha_{22}(t)$ в уравнении (2), (эффект «сарафанного радио»).

Члены вида $\alpha_{22}(t) \times N_2$ и $\alpha_{12}(t) \times N_1$ в уравнениях (1) и (2), соответственно, показывают влияние антирекламы со стороны покупателей: в первом случае — отдавших предпочтение второму товару, а во втором случае — купивших первый товар, а не второй. Для получения решения в замкнутой (аналитической) форме все коэффициенты, входящие в систему (1), (2) считаются константами, т. е. $\alpha_{ij} = \text{const}$; $i, j = 1, 2$. Для прогнозов, приближенных к реальным, данные коэффициенты следует считать зависящими от времени. В этом случае необходимо применять численные методы интегрирования задачи (1)–(3).

Результаты исследования. Для решения поставленной задачи сложим уравнения (1) и (2):

$$\frac{d(N_1 + N_2)}{dt} = [\alpha_{11} + \alpha_{21}] \times (N_0 - (N_1 + N_2)). \quad (4)$$

Введем замену переменных в уравнении (4):

$$v(t) \equiv (N_0 - (N_1 + N_2)), \quad (5)$$

то получим уравнение с разделяющимися переменными вида

$$\frac{dv}{dt} = -[\alpha_{11} + \alpha_{21}] \times v, \quad t > 0, \quad (6)$$

с начальным условием

$$v(0) \equiv N_0 - (N_{10} + N_{20}), \quad t = 0, \quad (7)$$

решением которого будет функция

$$v(t) \equiv (N_0 - (N_{10} + N_{20})) \times \exp(-(\alpha_{11} + \alpha_{21})t), \quad t > 0. \quad (8)$$

Полученное решение позволяет получить обыкновенное дифференциальное уравнение (ОДУ) первого порядка относительно каждой из функций $N_1(t)$, $N_2(t)$. Если выразить $N_2(t)$ из соотношения (8), с учетом замены (5), получится:

$$N_2(t) = N_0 - N_1(t) - (N_0 - (N_{10} + N_{20})) \times \exp(-(\alpha_{11} + \alpha_{21})t). \quad (9)$$

Данное представление для $N_2(t)$ нужно подставить в уравнение (1) и прийти к ОДУ первого порядка относительно функции $N_1(t)$:

$$\begin{aligned} \frac{dN_1}{dt} = & [\alpha_{11} + \alpha_{12}N_1 - \alpha_{22}(N_0 - N_1 - (N_0 - (N_{10} + N_{20})) \exp(-(\alpha_{11} + \alpha_{21})t))] \times \\ & \times (N_0 - N_1 - (N_0 - N_1 - (N_0 - (N_{10} + N_{20})) \exp(-(\alpha_{11} + \alpha_{21})t))). \end{aligned}$$

Если привести подобные члены и перенести слагаемые, содержащие функцию $N_1(t)$ в левую часть, получится линейное относительно искомой функции ОДУ вида:

$$\frac{dN_1}{dt} + (\alpha_{12} + \alpha_{22})(N_0 - (N_{10} + N_{20})) \exp(-(\alpha_{11} + \alpha_{21})t) N_1 = \quad (10)$$

$$= -(\alpha_{11} + \alpha_{22}N_0 + \alpha_{22}(N_0 - (N_{10} + N_{20})) \exp(-(\alpha_{11} + \alpha_{21})t))(N_0 - (N_{10} + N_{20})) \exp(-(\alpha_{11} + \alpha_{21})t).$$

Для краткости записи введены обозначения:

$$N_{30} = N_0 - (N_{10} + N_{20}), \quad \alpha_3 = \alpha_{11} + \alpha_{21}, \quad \alpha_4 = \alpha_{12} + \alpha_{22}.$$

Тогда уравнение (10) примет вид:

$$\frac{dN_1}{dt} + \alpha_4 N_{30} \exp(-\alpha_3 t) N_1 = -(\alpha_{11} - \alpha_{22}N_0 + \alpha_{22}N_{30} \exp(-\alpha_3 t)) N_{30} \exp(-\alpha_3 t). \quad (11)$$

Решается данное уравнение методом вариации произвольной постоянной. Нетрудно найти решение однородного ОДУ — функцию $N_{01}(t)$:

$$\frac{dN_{01}}{dt} + \alpha_4 N_{30} \exp(-\alpha_3 t) N_{01} = 0, \quad N_{01}(t) = C \exp\left(\frac{\alpha_4}{\alpha_3} N_{30} \exp(-\alpha_3 t)\right), \quad (12)$$

где C полагается функцией, зависящей от времени, $C = C(t)$:

$$N_1(t) = C(t) N_{01}(t). \quad (13)$$

Для удобства дальнейших преобразований введена новая независимая переменная:

$$u = \exp(-\alpha_3 t). \quad (14)$$

Тогда:

$$\frac{dN_1}{dt} = \frac{dN_1}{du} \frac{du}{dt} = -\alpha_3 \frac{dN_1}{du} \exp(-\alpha_3 t) = -\alpha_3 \frac{dN_1}{du} u. \quad (15)$$

С учетом соотношения (14) записывается равенство (12) в виде:

$$N_1(u) = C(u) \exp\left(\frac{\alpha_4}{\alpha_3} N_{30} u\right) \quad (16)$$

и уравнение (11) с учетом равенств (14)–(16) будет выглядеть так:

$$-\alpha_3 \frac{dN_1}{du} + \alpha_4 N_{30} N_1 u = [\alpha_{11} - \alpha_{22} N_0 + \alpha_{22} N_{30} u] N_{30} u.$$

Если сократить обе части последнего равенства на функцию u , не равную нулю (см. (14)), и подставить (16) в полученное уравнение, то ОДУ для $C(u)$ будет таким:

$$\frac{dC}{du} = [\alpha_{11} - \alpha_{22} N_0 + \alpha_{22} N_{30} u] N_{30} \exp\left(-\frac{\alpha_4}{\alpha_3} N_{30} u\right). \quad (17)$$

Решение данного уравнения с разделяющимися переменными не представляет труда, поскольку $C(u)$ можно представить как сумму легко берущихся интегралов

$$I_1 = \int [\alpha_{11} - \alpha_{22} N_0] N_{30} \exp\left(-\frac{\alpha_4}{\alpha_3} N_{30} u\right) du = (\alpha_{22} N_0 - \alpha_{11}) \frac{\alpha_3}{\alpha_4} \exp\left(-\frac{\alpha_4}{\alpha_3} N_{30} u\right) \quad (18)$$

и интеграла I_2 , который вычисляется однократным применением формулы интегрирования по частям

$$I_2 = \int \alpha_{22} (N_{30})^2 u \exp\left(-\frac{\alpha_4}{\alpha_3} N_{30} u\right) du = -\frac{\alpha_3 \alpha_{22} N_{30} u}{\alpha_4} \exp\left(-\frac{\alpha_4}{\alpha_3} N_{30} u\right) - \frac{\alpha_3 \alpha_{22}}{\alpha_4^2} \exp\left(-\frac{\alpha_4}{\alpha_3} N_{30} u\right). \quad (19)$$

При сложении (18) и (19) образуется формула для расчета коэффициента $C(u)$:

$$C(u) = ((\alpha_{22} N_0 - \alpha_{11}) \frac{\alpha_3}{\alpha_4} - \frac{\alpha_3 \alpha_{22} N_{30} u}{\alpha_4} - \frac{\alpha_3^2 \alpha_{22}}{\alpha_4^2}) \exp\left(-\frac{\alpha_4}{\alpha_3} N_{30} u\right). \quad (20)$$

Если подставить выражение (20) для $C(u)$ в равенство (16), то получится общее решение для функции N_1 , которое после умножения на некоторую константу K , определенную таким образом, чтобы удовлетворить начальному условию $N_1(0) = N_{10}$, дает решение для функции N_1 , входящей в задачу Коши:

$$N_1(u) = C(u) \exp\left(\frac{\alpha_4}{\alpha_3} N_{30} u\right),$$

$$C(u) = K((\alpha_{22} N_0 - \alpha_{11}) \frac{\alpha_3}{\alpha_4} - \frac{\alpha_3 \alpha_{22} N_{30} u}{\alpha_4} - \frac{\alpha_3^2 \alpha_{22}}{\alpha_4^2}) \exp\left(-\frac{\alpha_4}{\alpha_3} N_{30} u\right).$$

В итоге последние два равенства будут иметь вид:

$$N_1(u) = K((\alpha_{22} N_0 - \alpha_{11}) \frac{\alpha_3}{\alpha_4} - \frac{\alpha_3 \alpha_{22} N_{30} u}{\alpha_4} - \frac{\alpha_3^2 \alpha_{22}}{\alpha_4^2}), \quad (21)$$

где

$$u = \exp(-\alpha_3 t), N_{30} = N_0 - (N_{10} + N_{20}), \alpha_3 = \alpha_{11} + \alpha_{21}, \alpha_4 = \alpha_{12} + \alpha_{22}. \quad (22)$$

Чтобы закончить формирование решения для функции $N_1(t)$, следует определить константу K , исходя из начального условия (3) для $N_1(0)$. Несложные вычисления приводят к следующему равенству:

$$K = N_{10} / ((\alpha_{22} N_0 - \alpha_{11}) \frac{\alpha_3}{\alpha_4} - \frac{\alpha_3 \alpha_{22} N_{30}}{\alpha_4} - \frac{\alpha_3^2 \alpha_{22}}{\alpha_4^2}). \quad (23)$$

Определение функции $N_2(t)$ из равенства (5), в случае найденной функции $N_1(t)$, не представляет труда, так как:

$$N_2(t) = N_0 - N_1(t) - (N_0 - (N_{10} + N_{20})) \times \exp(-(\alpha_{11} + \alpha_{21})t).$$

Замечание.

В случае неодновременного старта продаж товаров (например, продажи второго вида стартуют не в начальный момент времени, а при $t = T$), необходимо определить $N_1(T)$, исходя из известного решения для логистической модели рекламной кампании продажи одного вида товара [1], затем изменить правые части ОДУ (1) и (2) и начальные условия (3):

$$\begin{aligned}\frac{dN_1(t)}{dt} &= [\alpha_{11}(t) + \alpha_{12}(t) \times N_1(t) - \alpha_{22}(t) \times N_2(t)] \times (N_0 - N_1(t) - N_1(T) - N_2(t)), \\ \frac{dN_2}{dt} &= [\alpha_{21}(t) + \alpha_{22}(t) \times N_2(t) - \alpha_{12}(t) \times N_1(t)] \times (N_0 - N_1(t) - N_1(T) - N_2(t)), \\ &t > T,\end{aligned}$$

$$N_{10} = N_1(T), N_2(T) = N_{20}, t = T.$$

Таким образом, приведено решение для случая постоянных коэффициентов, определяемых следующими факторами: общее число потенциальных платежеспособных покупателей первого и второго товаров; интенсивность рекламной кампании, в основном, посредством ЭСМИ; положительное влияние на продажи взаимодействия уже купивших первый или второй вид товара с потенциальными покупателями, неформальную (на уровне покупателей) антирекламу, для соответствующей задачи Коши в замкнутом виде.

Заключение и обсуждения. Полученные результаты могут быть использованы для «проигрывания» модельных ситуаций организации рекламы с целью определения условий извлечения наибольшей прибыли от продаж за вычетом расходов на рекламу. Для прогнозов, приближенных к реальным, следует отказаться от предположения $\alpha_{ij} = \text{const}; i, j = 1, 2$ и данные коэффициенты считать зависящими от времени. Тогда необходимо применять численные методы интегрирования задачи (1)–(3). Кроме того, определение этих коэффициентов в прогностических моделях представляет отдельную задачу математической статистики [3, 4], для которой, например, можно использовать данные опросов на выходе из мест массовых продаж товаров (торговых центров). По сути, этот подход близок к технологии exit polls, применяемой на выборах. Указанные аспекты исследования станут предметом будущих работ по данной тематике.

Список литературы

1. Самарский, А. А. Математическое моделирование: Идеи. Методы. Примеры / А. А. Самарский, А. П. Михайлов. — 2-е изд., испр. — Москва : Физматлит, 2001. — 320 с.
2. Петров, А. А. Опыт математического моделирования экономики / А. А. Петров, И. Г. Поспелов, А. А. Шанин. — Москва : Энергоиздат, 1996. — 544 с.
3. Петухов, А. Ю. Моделирование и анализ социально-политических процессов в республике Беларусь осенью 2020 года / А. Ю. Петухов, Д. И. Каминченко // Вестник Томского государственного университета. Философия. Социология. Политология. — 2021. — Т. 64. — С. 214–223. <https://doi.org/10.17223/1998863X/64/20>
4. Petrov, A. Modeling the Spread of a Message in a Population with Differential Receptivity / A. Petrov // Lecture Notes in Networks and Systems (LNNS). — 2022. — Vol. 503. — P. 35–40. https://doi.org/10.1007/978-3-031-09073-8_4

Поступила в редакцию 09.02.2023.

Поступила после рецензирования 02.03.2023.

Принята к публикации 03.03.2023.

Об авторе:

Сухинов Александр Иванович, член-корреспондент РАН, доктор физико-математических наук, профессор, директор НИИ Математического моделирования и прогнозирования сложных систем, Донской государственной технической университет (РФ, 344003, г. Ростов-на-Дону, пл. Гагарина, 1), [MathSciNet](#), [eLibrary.ru](#), [ORCID](#), [ResearcherID](#), [ScopusID](#).

Автор прочитал и одобрил окончательный вариант рукописи.

УДК 519.6

Научная статья

<https://doi.org/10.23947/2587-8999-2023-6-1-27-33>**Прямое численное моделирование: топография дневной поверхности и анизотропия верхней части разреза****В. И. Голубев^{1,2} , А. В. Шевченко^{1,2} , А. В. Екименко³ , В. Ю. Петрухин⁴ **¹Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), Российская Федерация, г. Долгопрудный, Институтский переулок, 9²Институт автоматизации проектирования Российской Академии Наук, Российская Федерация, г. Москва, ул. 2-я Брестская, 19/18³ООО «Газпромнефть НТЦ», Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, наб. реки Мойки, 75–79д⁴ПАО Сбербанк, г. Москва, ул. Вавилова, 19✉ w.golubev@mail.ru**Аннотация**

Введение. Одной из проблем разработки нефтегазовых месторождений является построение корректных геологических моделей подповерхностного пространства. Исследователями из различных научных групп во всем мире предложены различные способы повышения точности компьютерного моделирования, используемого в этом процессе. Цель настоящего исследования — оценка степени влияния рельефа дневной поверхности и анизотропии верхней части геологического разреза на регистрируемый сейсмический сигнал на примере реалистичной модели Оренбургского месторождения.

Материалы и методы. Рассмотрена сейсмогеологическая модель, описывающая нижнепермский интервал Оренбургского геологического разреза. По скважинным данным оценены упругие свойства геологических пластов: плотность и скорости распространения продольных и поперечных волн. Отмечается высокий контраст скоростей продольных волн, оцененных по диаграммам акустического каротажа. Резервуар в этой модели приурочен к нижним пластам. Он сложен сульфатно-карбонатными средами, однородными по плотности и акустическим свойствам. С использованием сеточно-характеристического метода были рассчитаны синтетические сейсмограммы нулевых удалений. Выбор структурных криволинейных расчетных сеток позволил корректно провести учет рельефа дневной поверхности.

Результаты исследования. В работе было проведено сопоставление двух различных моделей. В первую модель была включена анизотропия верхней части разреза и топография дневной поверхности. Во второй модели верхняя граница расчетной области была плоской, и вся среда рассматривалась в рамках изотропной линейно упругой модели. Анализ синтетических сейсмограмм показал, что анизотропия, присущая этой модели, не оказывает существенного влияния на регистрируемое сейсмическое волновое поле. Однако учет рельефа дневной поверхности заметно сдвигает времена прихода отраженных волн.

Обсуждение и заключение. Представленный в работе алгоритм может быть использован для верификации графа обработки полевых данных, поскольку оценка анизотропии среды является стандартным шагом при построении скоростной модели. Представленный подход может быть расширен на трехмерные модели реалистичных размеров.

Ключевые слова: математическое моделирование, сейсмическая разведка, сеточно-характеристический численный метод, анизотропные среды, топография дневной поверхности

Финансирование. Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 19-71-10060, <https://rscf.ru/project/19-71-10060/>.

Для цитирования. Прямое численное моделирование: топография дневной поверхности и анизотропия верхней части разреза / В. И. Голубев, А. В. Шевченко, А. В. Екименко, В. Ю. Петрухин // Computational Mathematics and Information Technologies. — 2023. — Т. 6, № 1. — С. 27–33.

<https://doi.org/10.23947/2587-8999-2023-6-1-27-33>

Direct seismic modeling: day surface topography and shallow subsurface anisotropyV. I. Golubev^{1,2} , A. V. Shevchenko^{1,2} , A. V. Ekimenko³ , V. Yu. Petrukhin⁴ ¹Moscow Institute of Physics and Technology (National Research University), 9, Institutskii lane, Dolgoprudny, Russian Federation²Institute of Computer Aided Design of RAS, 19/18, 2-nd Brestskaya St., Moscow, Russian Federation³Gazprom Neft Science and Technology Centre, 75–79d, Moika emb. river, St. Petersburg, Russian Federation⁴PAO Sberbank, 19, Vavilova St., Moscow, Russian Federation✉ w.golubev@mail.ru**Abstract**

Introduction. The article is devoted to one of the problems in the development of oil and gas fields — the construction of correct geological models of the subsurface space. Researchers from various scientific groups around the world have proposed various ways to improve the accuracy of the computer simulations used in this process. The purpose of this study is to assess the degree of influence of the day surface relief and the anisotropy of the upper part of the geological section on the recorded seismic signal using a realistic model of the Orenburg field as an example.

Materials and methods. A seismogeological model describing the Lower Permian interval of the Orenburg geological section is considered. According to well data, the elastic properties of geological formations were estimated: density and propagation velocities of longitudinal and transverse waves. There is a high contrast of P-wave velocities estimated from sonic logs. The reservoir in this model is confined to the lower layers. It is composed of sulfate-carbonate media, uniform in density and acoustic properties. Using the grid-characteristic method, zero-offset synthetic seismograms were calculated. The choice of structural curvilinear computational grids made it possible to correctly consider the relief of the day surface.

Research results. In this work, two different models were compared. The first model included the anisotropy of the upper part of the section and the topography of the day surface. In the second model, the upper boundary of the computational domain was flat, and the entire medium was considered within the framework of an isotropic linear elastic model. The analysis of synthetic seismograms showed that the anisotropy inherent in this model does not significantly affect the recorded seismic wave field. However, considering the relief of the day surface significantly shifts the times of arrival of reflected waves.

Discussion and Conclusion. The algorithm presented in the paper can be used to verify the field data processing graph, since the assessment of the anisotropy of the medium is a standard step in building a velocity model. The presented approach can be extended to 3D models of realistic dimensions.

Keywords: mathematical modeling, seismic exploration, grid-characteristic numerical method, anisotropic media, day surface topography.

Funding information. The research was carried out at the expense of the grant of the Russian Science Foundation No. 19-71-10060, <https://rscf.ru/project/19-71-10060/>.

For citation. Direct seismic modeling: day surface topography and shallow subsurface anisotropy / V. I. Golubev, A. V. Shevchenko, A. V. Ekimenko, V. Yu. Petrukhin // Computational Mathematics and Information Technologies. — 2023. — Vol. 6, no. 1. — P. 27–33. <https://doi.org/10.23947/2587-8999-2023-6-1-27-33>

Введение. Проблема учета в вычислительной модели топографии дневной поверхности при проведении сейсмического моделирования исследуется многими учеными. Простейший подход основан на ступенчатом описании границы и конечно-разностных схемах [1] на прямоугольных сетках. Однако он приводит к появлению дополнительных артефактов-источников из-за дифракции. Метод повернутых сдвинутых сеток был предложен для сопоставления сетки с границами области [2]. Использование конечно-разностных схем на деформированных сетках не позволяет описывать очень крутые наклоны в рельефе [3]. В работе [4] был предложен псевдоспектральный метод с отображением прямоугольных сеток на криволинейную поверхность, который также оказался неустойчив вблизи сильно наклонных границ. По-видимому, приемлемым решением является использование конечно-элементных методов на неструктурных сетках [5]. Недостатком данного подхода является значительное возрастание вычислительной сложности задачи и требуемой оперативной памяти.

В работе [6] был предложен подход по комбинированию разрывного метода Галёркина с методом конечных разностей. Он позволяет использовать неструктурные сетки только вблизи поверхности, покрывая основную часть геологического массива структурной сеткой.

Для расчета волновых полей в упругих средах с резким изменением упругих параметров может быть использован сеточно-характеристический метод [7, 8]. С ним был объединен метод наложенных сеток, позволяющий корректно описывать криволинейные границы [9]. В настоящем исследовании используется другой подход. Отдельная криволинейная сетка используется для покрытия каждого геологического слоя, совместно с явной постановкой контактных условий между отдельными слоями. Данный метод сохраняет преимущества сеточно-характеристического метода, не приводя к чрезмерному возрастанию вычислительной сложности задачи. В работе учитывается тонкослоистость верхней части геологического разреза с применением широко используемой VTI модели среды [10, 11].

Целью данной работы являлась оценка степени влияния рельефа дневной поверхности и анизотропии верхней части геологического разреза на регистрируемый сейсмический сигнал на примере реалистичной модели Оренбургского месторождения.

Материалы и методы. Значительный объем сейсморазведки связан с изучением нефтегазоносных бассейнов. Эти территории, сложенные осадочными породами, представляют собой мощные толщи тонкослойного переслаивания. Условия образования осадочных пород определяют различие физических свойств каждого слоя. Геологическая история каждого региона определяет современное положение сформировавшихся пластов горных пород. Поэтому характерным признаком является наличие пластов, вытянутых в поперечном направлении, но маломощных по отношению к используемым длинам сейсмических волн. Это дает возможность описать данную геологическую среду моделью VTI. Она была сформулирована в связи с регистрацией разных скоростей для вертикальных и наклонных сейсмических лучей в 1930-х годах. В работе рассмотрена сейсмогеологическая модель, описывающая нижнепермский интервал Оренбургского геологического разреза. Физические свойства оценивались по скважинным данным Оренбургского нефтегазоконденсатного месторождения (рис. 1 а). Выделены две основные части модели: 1) тонкослоистый верхний интервал, соответствующий кунгурскому ярусу, 2) нижний интервал, описывающий филипповский горизонт и артинский ярус. Первая часть представлена чистыми солями и прослоями каменной соли, ангидритов и доломитов. Отмечается высокий контраст скоростей продольных волн, оцененных по диаграммам акустического каротажа. Типичное значение для каменной соли составило 4500 м/с, для ангидритов — 6300 м/с, а для доломитов — в диапазоне от 4500 м/с до 6500 м/с (рис. 1 б). Этот интервал влияет на кинематические характеристики волнового поля и вызывает анизотропию.

На рис. 2 представлены полевые сейсмические данные. Чередование доломитовых, солевых и ангидритовых слоев приводит к наличию динамически выраженных отражений. Разрез показывает сложную геометрию отражающих границ верхнего интервала и процессы галокинеза, сопровождающиеся проникновением солей в вышележащие терригенные толщи. Можно предположить, что в областях расположения контрастного субгоризонтального слоя параметры анизотропии будут иными, чем у соляных диапиров. Резервуар в этой модели приурочен к нижним пластам. Он сложен сульфатно-карбонатными средами, однородными по плотности и акустическим свойствам. Отражающие границы в этом интервале малоконтрастны. Этот факт объясняется отсутствием акустически жестких границ. По данным геофизических исследований скважин интервал относительно однороден (рис. 1 а). На основе приведенного выше описания была разработана упругая двумерная модель. Для достижения требуемой точности моделью VTI был описан тонкослоистый интервал.

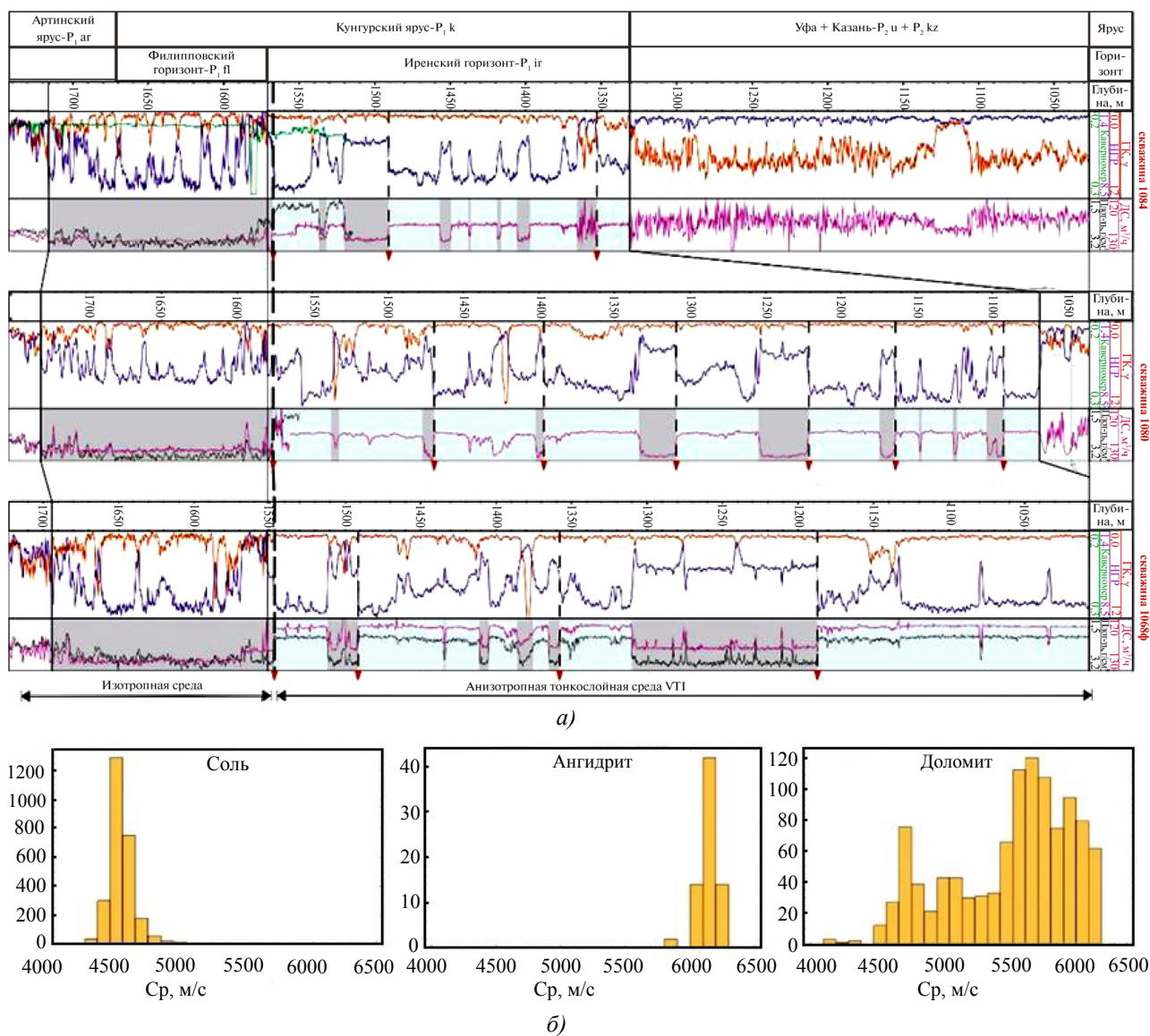


Рис. 1. Результаты натурных измерений: а — скважинные данные с Оренбургского газоконденсатного месторождения; б — гистограммы распределения скорости продольных волн по акустическим данным

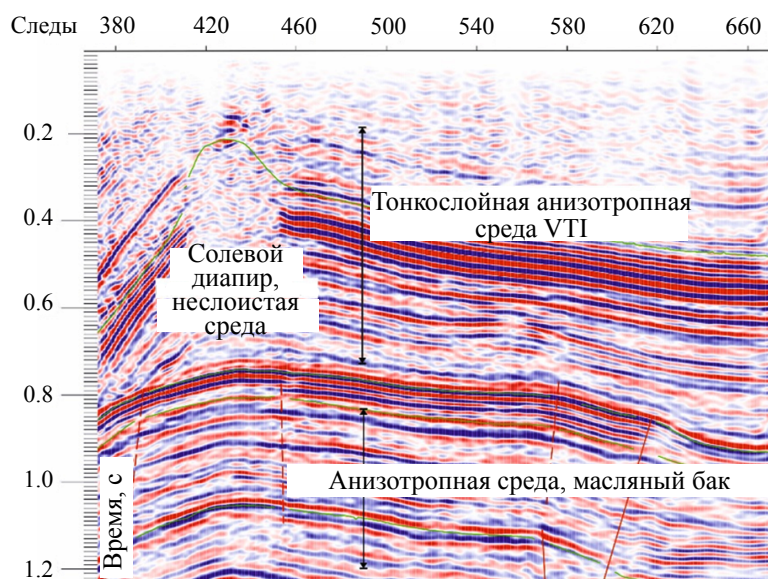


Рис. 2. Сейсмический разрез Оренбургского месторождения

Определяющая система уравнений в частных производных гиперболического типа имеет вид:

$$\vec{q}_t + A_1 \vec{q}_x + A_2 \vec{q}_y = \vec{f},$$

где вектор $\vec{q}_i$ состоит из всех неизвестных задачи (компоненты вектора скорости и тензора напряжений). Значения элементов матриц A_1, A_2 определяются параметрами геологической среды. Для решения исходной системы используется процедура расщепления по пространственным направлениям. Сначала решается одномерная система $\vec{q}_t + A_1 \vec{q}_x = \vec{0}$, потом решается $\vec{q}_t + A_2 \vec{q}_y = \vec{0}$ и после — $\vec{q}_t = \vec{f}$. Таким образом, многомерная задача сводится к набору одномерных задач. Учет правой части может быть эффективно реализован, поскольку он выполняется независимо в каждом узле расчетной сетки. Каждая решаемая одномерная система имеет вид:

$$\vec{q}_t + A \vec{q}_\xi = \vec{0}.$$

Гиперболичность системы означает, что матрица A имеет полный набор собственных векторов и может быть представлена в виде:

$$A = \Omega^{-1} \Lambda \Omega,$$

где матрица Λ диагональная и состоит из собственных значений матрицы A . Вводя в рассмотрение переход в инварианты $\vec{w} = \Omega \vec{q}$, получаем набор независимых линейных уравнений переноса вида: $\vec{w}_t + \Lambda \vec{w}_\xi = \vec{0}$. Для каждого из них справедливо характеристическое соотношение:

$$w_i(x, t + \tau) = w_i(x - \lambda_i \tau, t),$$

где нижний индекс обозначает соответствующую компоненты вектора. Обратный переход к переменным задачи осуществляется невырожденным преобразованием: $\vec{q} = \Omega^{-1} \vec{w}$.

Критически важным отличием при реализации данного метода на прямоугольных и криволинейных сетках является тот факт, что в первом случае существуют лишь два выделенных направления, вдоль которых матрицы Ω могут быть предвычислены автоматически. В случае криволинейных сеток в каждой точке строится локальная система координат (ξ, η) , вдоль осей которой вычисляются матрица Ω и обратная к ней с помощью численной итерационной процедуры.

Результаты исследования. Было проведено распространение упругих волн в описанной геологической модели. Использовалась структурная сетка, построенная с использованием программного обеспечения UNAMALLA [12] и покрывающая область размерами 10 км × 5 км. Отдельные одномерные уравнения переноса решались по схеме Русанова. Пространственный шаг сетки составлял порядка 2 м. Шаг по времени выбирался из условия устойчивости Куранта. Рассматривалось две постановки задачи. Первая — включающая анизотропию и топографию, вторая — не включающая их. Результаты расчетов представлены на рис. 3. Тщательный анализ синтетических данных показал, что анизотропия, присущая этой модели, не оказывает существенного влияния на сейсмическое волновое поле. Однако рельеф заметно сдвигает времена прихода отраженных волн.

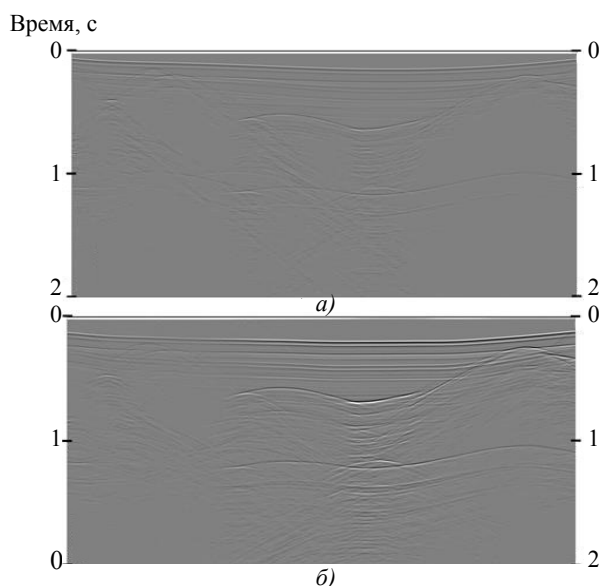


Рис. 3. Синтетические сейсмограммы: *a* — изотропной модели с плоской дневной поверхностью; *б* — анизотропной модели с топографией

Обсуждение и заключения. Проведено исследование влияния топографии дневной поверхности и анизотропии верхней части разреза на данные сейсмической разведки. Рассматриваемая геологическая модель основывалась на реальном месторождении нефти и газа (Оренбургское месторождение). Сеточно-характеристический метод на структурированных сетках был успешно применен для учета анизотропии и криволинейных границ в модели. Рассчитанное волновое поле содержит основные особенности исходного сейсмического разреза, что подтверждает адекватность построенной модели. Результаты проведенных расчетов свидетельствуют о значительном влиянии рассматриваемых факторов на регистрируемый на дневной поверхности сигнал.

Представленный в работе алгоритм может быть использован для верификации графа обработки полевых данных, поскольку оценка VTI анизотропии является стандартным шагом при построении скоростной модели [13]. Представленный подход может быть расширен на трехмерные модели реалистичных размеров.

Список литературы

1. Virieux J. P-SV wave propagation in heterogeneous media: Velocity — stress finite-difference method / J. Virieux // *Geophysics*. — 1986. — Vol. 51, no. 4. — P. 889–901.
2. Saenger, E. H. Finite-difference modeling of viscoelastic and anisotropic wave propagation using the rotated staggered grid / E. H. and T. B. Saenger // *Geophysics*. — 2004. — Vol. 69, no. 2. — P. 583–591.
3. Tarrass, I. New curvilinear scheme for elastic wave propagation in presence of curved topography / I. Tarrass, L. Giraud and P. Thore // *Geophys.* — 2011. — Vol. 59, no. 5. — P. 889–906.
4. Tessmer, E. Elastic wave propagation simulation in the presence of surface topography / E. Tessmer, D. and A. B. Kosloff // *Geophys.* — 1992. — Vol. 108, no. 2. — P. 621–632.
5. An hpadaptive discontinuous Galerkin finite-element method for 3D elastic wave modelling / V. Etienne, E. Chaljub, J. Virieux and N. Glinsky // *Geophysical Journal International*. — 2010. — Vol. 183. — P. 941–962.
6. Lisitsa, V. Combination of the discontinuous Galerkin method with finite differences for simulation of seismic wave propagation / V. Lisitsa, V. Tcheverda and C. Botter // *Journal of Computational Physics*. — 2016. — Vol. 311. — P. 142–157.
7. Compact Grid-Characteristic Scheme for the Acoustic System with the Piece-Wise Constant Coefficients / V. Golubev, A. Shevchenko, N. Khokhlov, I. Petrov and M. Malovichko // *International Journal of Applied Mechanics*. — 2022. — Vol. 14, no. 2.
8. Golubev, V. Raising convergence order of grid-characteristic schemes for 2D linear elasticity problems using operator splitting / V. Golubev, A. Shevchenko and I. Petrov // *Computer Research and Modeling* — 2022. — Vol. 14, no. 4. — P. 899–910.
9. Khokhlov, N. I. Overset grids approach for topography modeling in elastic-wave modeling using the grid-characteristic method. / N. I. Khokhlov, V. O. Stetsyuk and I. A. Mitskovets // *Computer Research and Modeling*. — 2019. — Vol. 11, no. 6. — P. 1049–1059.
10. Petrov, I. B. Simulation of Seismic Waves in Anisotropic Media / I. B. Petrov, V. I. Golubev, V. Y. Petrukhin and I. S. Nikitin // *Mathematics*. — 2021. — Vol. 103, no. 3. — P. 146–150.
11. Golubev, V. Explicit simulation of seismic waves in fractured VTI media. / V. Golubev and A. Shevchenko // 82nd EAGE Annual Conference and Exhibition. — 2021.
12. Generating Quality Structured Convex Grids on Irregular Regions / P. Barrera, F. Dominguez, G. F. Gonzalez G. and Tinoco // *Electronic Transactions on Numerical Analysis*. — 2009. — Vol. 34. — P. 76–89.
13. Deep Convolutional Neural Networks in Seismic Exploration Problems / A. Vasyukov, I. Nikitin, A. Stankevich and V. Golubev // *Interfacial Phenomena and Heat Transfer*. — 2022. — Vol. 10, no. 3. — P. 61–74.

Поступила в редакцию 07.02.2023.

Поступила после рецензирования 02.03.2023.

Принята к публикации 03.03.2023.

Об авторах:

Голубев Василий Иванович, ведущий научный сотрудник лаборатории прикладной вычислительной геофизики Московского физико-технического института (национального исследовательского университета) (РФ, 141701, Московская область, г. Долгопрудный, Институтский переулок, 9), доктор физико-математических наук, доцент, [ORCID](#), w.golubev@mail.ru

Шевченко Алексей Владимирович, аспирант Московского физико-технического института (национального исследовательского университета) (РФ, 141701, Московская область, г. Долгопрудный, Институтский переулок, 9), [ORCID](#), alexshevchenko@phystech.edu

Екименко Антон Валерьевич, эксперт блока интегрированных решений ООО «Газпромнефть НТЦ» (РФ, 190000, г. Санкт-Петербург, наб. реки Мойки, 75–79д), кандидат геолого-минералогических наук, [ORCID](#), ekimenko.av@gazpromneft-ntc.ru

Петрухин Вячеслав Юрьевич, руководитель направления ПАО Сбербанк (РФ, 117312, г. Москва, ул. Вавилова, 19), [ORCID](#), v.y.petrukhin@gmail.com

Заявленный вклад соавторов:

В. И. Голубев — постановка цели и задачи исследования, подготовка текста, формулирование выводов. А. В. Шевченко — проведение численных расчетов по изотропной модели без рельефа. А. В. Екименко — построение геологической модели, анализ результатов численных расчетов. В. Ю. Петрухин — проведение расчетов по анизотропной модели с рельефом.

Конфликт интересов.

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Все авторы прочитали и одобрили окончательный вариант рукописи.

УДК 519.6

Научная статья

<https://doi.org/10.23947/2587-8999-2023-6-1-34-40>**Моделирование пространственно-трехмерных волновых процессов в мелководных водоемах с учетом особенностей вертикального турбулентного обмена**Е. А. Проценко¹  , Н. Д. Панасенко² , А. В. Стражко¹ ¹Таганрогский институт имени А. П. Чехова (филиал) РГЭУ (РИНХ), Российская Федерация, Ростовская область, г. Таганрог, ул. Инициативная, 48 eapros@rambler.ru**Аннотация**

Введение. Достоверное предсказание показателей турбулентных потоков является весьма сложной задачей, что объясняется исключительной физической сложностью турбулентности, в частности ее вероятностной природой, широким пространственно-временным спектром и принципиально трехмерным нестационарным характером. Несмотря на проведение широкого круга исследований, ориентированных на рассматриваемую проблему, в них не была достаточно полно отражена вся совокупность разнообразных факторов и процессов, влияющих на структуру и параметры вертикального турбулентного перемешивания. Это указывает на необходимость проведения системного анализа проблемы и моделирования подобных сложно формализуемых систем. Целью работы является построение сценария изменения гидродинамических волновых процессов береговой зоны на основе усовершенствованной математической модели волновых процессов.

Материалы и методы. Исследуются пространственно-трехмерные волновые процессы в мелководных водоемах с учетом особенностей турбулентного обмена в зависимости от источника и локализации в столбе жидкости. Рассматривается влияние регулярных волновых процессов на турбулентный обмен по вертикали с помощью математической модели волновых процессов, базирующейся на системе уравнений Навье-Стокса. Модель включает в себя три уравнения движения в областях с динамически изменяемой геометрией расчетной области.

Результаты исследования. На основе разработанного комплекса программ построен сценарий изменения гидродинамических волновых процессов береговой зоны, предсказано формирование вихревых структур.

Обсуждение и заключения. Доказано разделение волнового потока на приповерхностный макротурбулентный слой, вызванный волновым движением, и нижерасположенный слой с фоновой гидродинамической турбулентностью, сила и интенсивность турбулентности изменялись синхронно с волновыми колебаниями, демонстрируя явно выраженную асимметрию генерации турбулентности по всей толще воды.

Ключевые слова: трехмерная модель гидродинамики, вертикальный турбулентный обмен, численные методы, волновые процессы, фильтрация данных.

Финансирование. Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-21-00210, <https://rscf.ru/project/23-21-00210/>.

Для цитирования. Проценко, Е. А. Моделирование пространственно-трехмерных волновых процессов в мелководных водоемах с учетом особенностей вертикального турбулентного обмена / Е. А. Проценко, Н. Д. Панасенко, А. В. Стражко // Computational Mathematics and Information Technologies. — 2023. — Т. 6, № 1. — С. 34–40. <https://doi.org/10.23947/2587-8999-2023-6-1-34-40>

Original article

Spatial-three-dimensional wave processes' modeling in shallow water bodies taking into account the vertical turbulent exchange featuresЕ. А. Protsenko¹  , N. D. Panasenko¹ , A. V. Strazhko¹ ¹Taganrog Institute named after A. P. Chekhov (branch) of RSUE, 48, Initiative St., Taganrog, Rostov region, Russian Federation eapros@rambler.ru

Abstract

Introduction. Reliable prediction of indicators of turbulent flows is a very difficult task, which is explained by the exceptional physical complexity of turbulence, in particular its probabilistic nature, a wide space-time spectrum and a fundamentally three-dimensional non-stationary nature. Despite conducting a wide range of studies focused on the problem under consideration, they did not fully reflect the totality of various factors and processes affecting the structure and parameters of vertical turbulent mixing. This indicates the need for a systematic analysis of the problem and modeling of such complex formalized systems. The aim of the work is to construct a scenario of changes in hydrodynamic wave processes of the coastal zone, based on an improved mathematical model of wave processes.

Materials and methods. The article is devoted to the study of spatial-three-dimensional wave processes in shallow water bodies, taking into account the features of turbulent exchange depending on the source and localization in the column of liquid, as well as the study of the influence of regular wave processes on turbulent exchange and vertically using a mathematical model of wave processes based on the system of Navier-Stokes equations, including three equations of motion in the with dynamically changing geometry of the computational domain.

The results of the study. Based on the developed software package, a scenario of changes in hydrodynamic wave processes of the coastal zone is constructed, the formation of vortex structures is predicted.

Discussion and conclusions. The separation of the wave flow into a near-surface macroturbulent layer caused by wave motion and a lower layer with background hydrodynamic turbulence is proved, the strength and intensity of turbulence changed synchronously with wave oscillations, demonstrating a pronounced asymmetry of turbulence generation throughout the water column.

Keywords: three-dimensional model of hydrodynamics, vertical turbulent exchange, numerical methods, wave processes, data filtering.

Funding information. The research was carried out at the expense of the grant of the Russian Science Foundation No. 23-21-00210, <https://rscf.ru/project/23-21-00210/>.

For citation. Protsenko, E. A. Modeling of spatial-three-dimensional wave processes in shallow water bodies taking into account the features of vertical turbulent exchange / E. A. Protsenko, N. D. Panasenko, A. V. Strazhko // Computational Mathematics and Information Technologies. — 2023. — Vol. 6, no. 1. — P. 34–40. <https://doi.org/10.23947/2587-8999-2023-6-1-34-40>

Введение. Современные численные модели SWAN, SWASH, FINLAB, H2Ocean и XBeach постоянно совершенствуются благодаря новым научным открытиям в результате исследований, включающих лабораторные и полевые эксперименты. С помощью лабораторных экспериментов можно получить информацию о деталях потока в контролируемых условиях. Скорости потока, свойства турбулентности и силы, действующие на объекты, могут быть определены и использованы для интерпретации наблюдаемых явлений, например, размыва, а данные могут быть использованы для валидации модели. При этом сложность получения натурных данных в реальной области свидетельствует о необходимости привлечения 3D-моделей гидродинамики, которые учитывают специфику прибрежных систем [1, 2].

Турбулентность и дальнейшее перемешивание водной среды являются важными механизмами, определяющими динамику береговой зоны, перенос импульса, массы и тепла. Турбулентность обычно возникает в результате сдвига или неустойчивой стратификации, при этом в прибрежной зоне альтернативным источником возникновения турбулентного перемешивания являются ветровые волны. Кроме того, турбулентность может порождаться в результате трения дна, возникающего при наличии приливных или ветровых течений, при этом важны бароклинные течения, нелинейные внутренние волны и инерционные токи [3–5].

Задача мониторинга водной поверхности предполагает создание и верификацию эффективных методов кластеризации этих объектов на поверхности водоемов, в частности, восстановления границ водоема на основании данных дистанционного зондирования. В качестве данных зондирования используются многоспектральные спутниковые снимки. На основе полученных изображений определяются начальные условия для математической

модели гидродинамики, исходя из которых выполняются прогностические расчеты. Данные дистанционного зондирования позволяют определять динамику изменения береговой линии благодаря серии обработанных снимков одной и той же акватории в разное время.

Прибрежные районы требуют особого внимания, поскольку взаимодействие с батиметрией, течениями, стратификацией, а также растительностью, приводит к сложным нелинейным взаимодействиям, влияющим на эволюцию волн.

Материалы и методы

1. Пространственно-неоднородная трехмерная математическая модель волновой гидродинамики мелководного водоема. Пространственно-неоднородная трехмерная математическая модель волновой гидродинамики мелководного водоема включает [6, 7]:

– уравнения движения (Навье-Стокса):

$$\begin{aligned} u'_t + uu'_x + vv'_y + ww'_z &= -\frac{1}{\rho} p'_x + (\mu u'_{xx})_x + (\mu u'_{yy})_y + (\nu u'_{zz})_z, \\ v'_t + uv'_x + vv'_y + ww'_z &= -\frac{1}{\rho} p'_y + (\mu v'_{xx})_x + (\mu v'_{yy})_y + (\nu v'_{zz})_z, \\ w'_t + uw'_x + vw'_y + ww'_z &= -\frac{1}{\rho} p'_z + (\mu w'_{xx})_x + (\mu w'_{yy})_y + (\nu w'_{zz})_z + g; \end{aligned} \quad (1)$$

– уравнение неразрывности:

$$\rho'_t + (\rho u)'_x + (\rho v)'_y + (\rho w)'_z = 0, \quad (2)$$

где $V = \{u, v, w\}$ — вектор скорости водного потока мелководного водоема; ρ — плотность водной среды, кг/м³; p — гидродинамическое давление, Па; g — ускорение свободного падения, м/с²; μ, ν — коэффициенты турбулентного обмена в горизонтальном и вертикальном направлениях.



Рис. 1. Спутниковые изображения акватории Азовского моря (отлив, 22 ноября 2019 года)

Построена растровая модель расчетной области на основе наблюдений в отдельных точках пространства (рис. 1). Дискретные операционно-территориальные единицы соответствуют ячейкам регулярной сетки. На рис. 2 представлена растровая модель расчетной области.

2. Обработка и параметризация натуральных данных ADCP-зондирования. Волновое возмущение, улавливаемое зондом ADCP, по частоте и интенсивности отличается от волнения на поверхности моря. Это происходит из-за взаимного перемещения судна, волн и соизмеримости их геометрических размеров. Движение судна на волне меняет частоту волнового возмущения. Если масштабы волны близки к размерностям (длина, ширина, осадка) судна, то оно не может при своем движении повторить ее профиль. Степень воздействия качки предусматривается с помощью редуционных коэффициентов, которые имеют вид амплитудно-частотных

характеристик линейных низкочастотных фильтров [7, 8]. Для представления минимальных разрешимых масштабов необходимо, чтобы ширина фильтра не превышала шага разностной сетки [9–11].

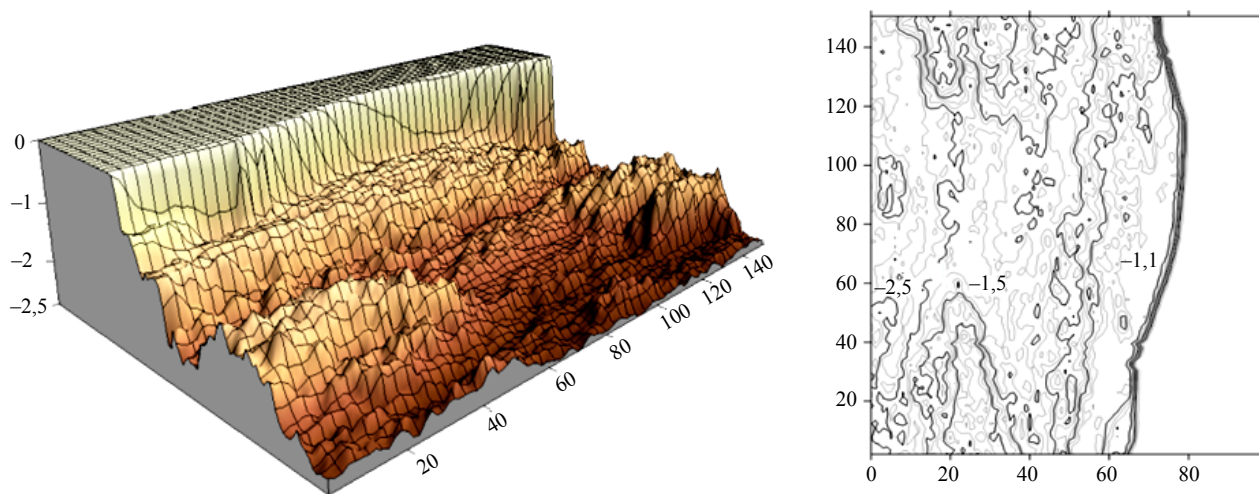


Рис. 2. Растровая модель расчетной области

Исходные данные получены в ходе экспедиции в Центрально-Восточной части Азовского моря и в Таганрогском заливе. Для измерения трехмерного вектора скорости движения водной среды использовался гидрофизический ADCP-зонд Workhorse Sentinel 600. Для обработки мгновенных скоростей водного потока, полученных при измерениях, использовались фильтры Гаусса и Фурье при разной величине ширины фильтра. В данных расчетах масштаб фильтра задавался исходя из размерности решаемой задачи гидродинамики и соответствующего данной размерности масштаба сетки.

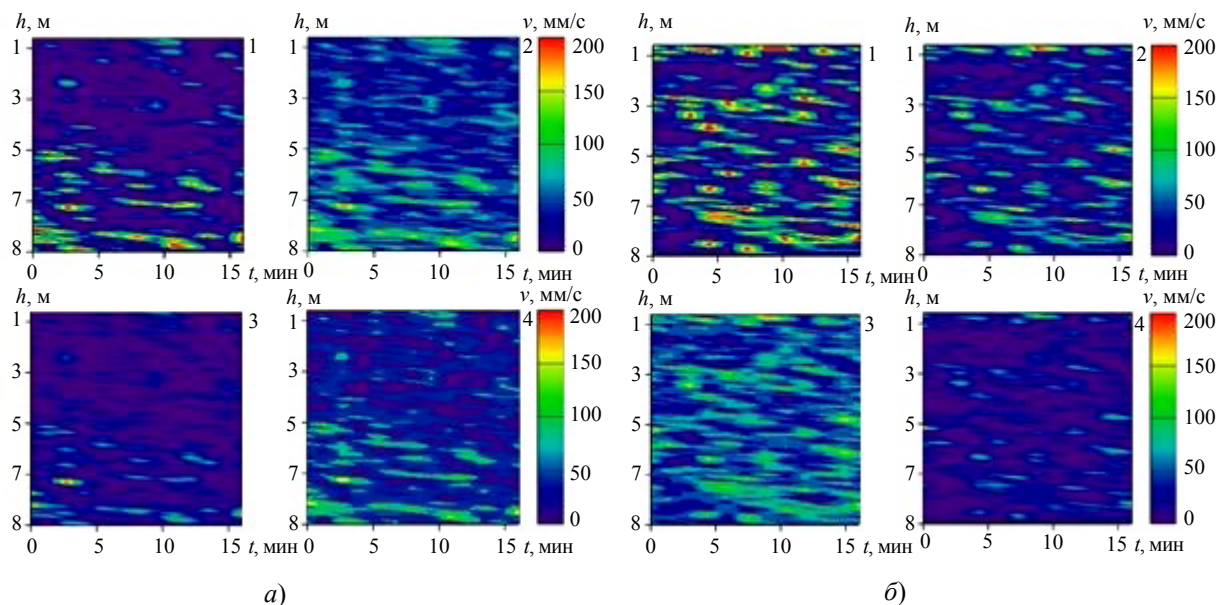


Рис. 3. Применение фильтров Гаусса (а) и Фурье (б):

1 — исходные данные; 2, 3, 4 — данные, полученные с помощью фильтрации, при различной величине ширины фильтра: $\Delta_4 < \Delta_3 < \Delta_2$

Рис. 3 демонстрирует результат работы программного обеспечения, предназначенного для устранения зашумленности экспедиционных измерений, на примере одной из составляющих вектора скорости водного потока в двумерном случае. Цветом выделена скорость водного потока в мм/с в соответствии с приведенной цветовой шкалой.

Результаты исследования На основании проведенных численных экспериментов проанализированы распределения коэффициентов вертикального турбулентного обмена с учетом влияния регулярных волн, а также в их отсутствие (рис. 4); доказано разделение волнового потока на приповерхностный макротурбулентный слой, вызванный волновым движением, и нижерасположенный слой с фоновой гидродинамической турбулентностью. Специфической особенностью действия регулярных волн на турбулентный обмен по вертикали стало увеличение коэффициента турбулентного обмена в приповерхностном слое и его уменьшение в придонном слое по сравнению с распределением коэффициентов, полученных с помощью параметризации Смагоринского.

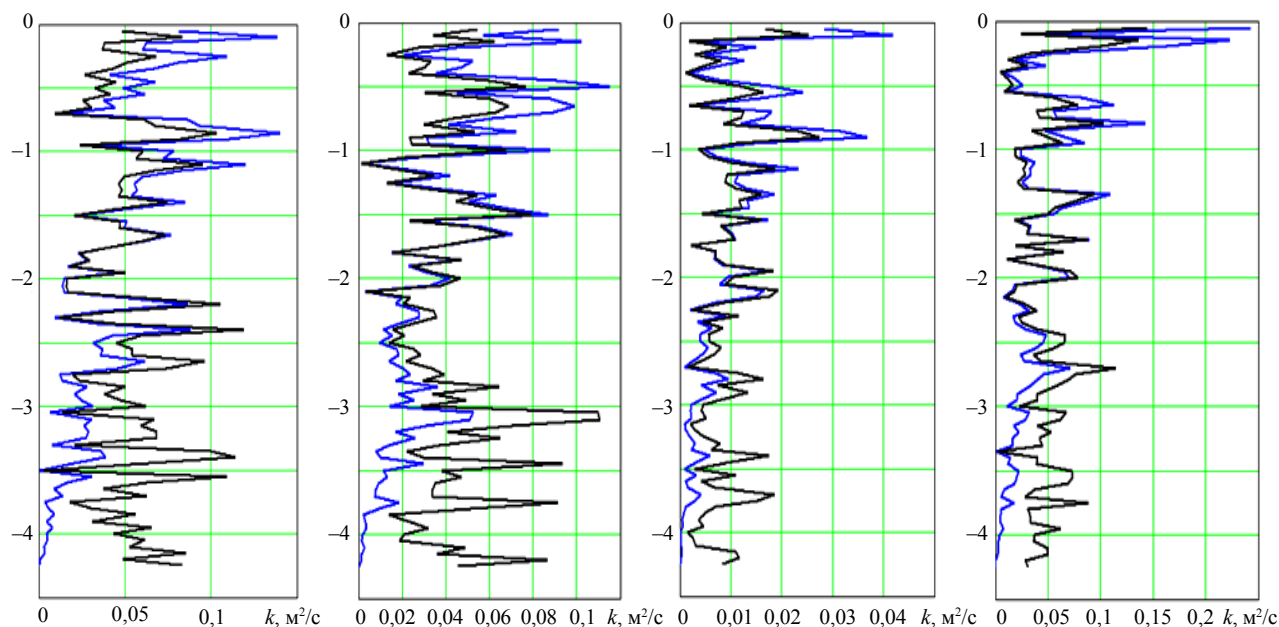


Рис. 4. Профили коэффициента вертикального турбулентного обмена:
черная линия — без учета регулярных волн; синяя — с учетом регулярных волн

Продемонстрирован также широкий спектр изменчивости турбулентных пульсаций скорости. Сила и интенсивность турбулентности изменялись синхронно с волновыми колебаниями, показывая явно выраженную асимметрию генерации турбулентности по всей толще воды, включая и приповерхностный слой, где волны усиливали флуктуации скорости течения [12–14].

Когда волны разбиваются в зоне прибоя, турбулентность может возникать несколькими способами:

- за счет сдвига жидкости;
- за счет разделения потока вокруг элементов шероховатости;
- за счет нагнетания турбулентной кинетической энергии от разбивающихся волн.

Над гладким морским дном в потоке пограничного слоя турбулентность начинает появляться, когда число Рейнольдса (Re) больше $1,5 \cdot 10^5$ ($Re = Au/\nu$, где A — орбитальная амплитуда и ν — кинематическая вязкость). Сдвиг между потоком и морским дном создает такие микротурбулентные вихри, как вихревые трубы и турбулентные пятна, которые возникают на нижней границе и распространяются вверх за счет диффузии. Горизонтальная скорость потока и турбулентная кинетическая энергия (k) более или менее совпадают по фазе, при этом k масштабируется с u^2 . Когда набегающие волны искажены, максимальное образование k происходит под гребнем волны.

Формы дна, такие как наносы от волн или мегарипплы, могут появляться снаружи и внутри зоны прибоя, когда наносы имеют умеренную или большую крутизну, они часто создают разделение потока и вихревое рассеивание. Турбулентные вихри образуются на подветренном склоне, когда горизонтальная скорость равна нулю. В этих когерентных вихрях турбулентность распространяется вверх за счет конвекции, а не за счет диффузии. Экспериментальные данные и метод осреднения Рейнольдса (RANS) показали, что вихревой выброс увеличивает k вблизи слоя. Для косых, мелководных волн выработка k максимальна при реверсировании потока с берега на шельф.

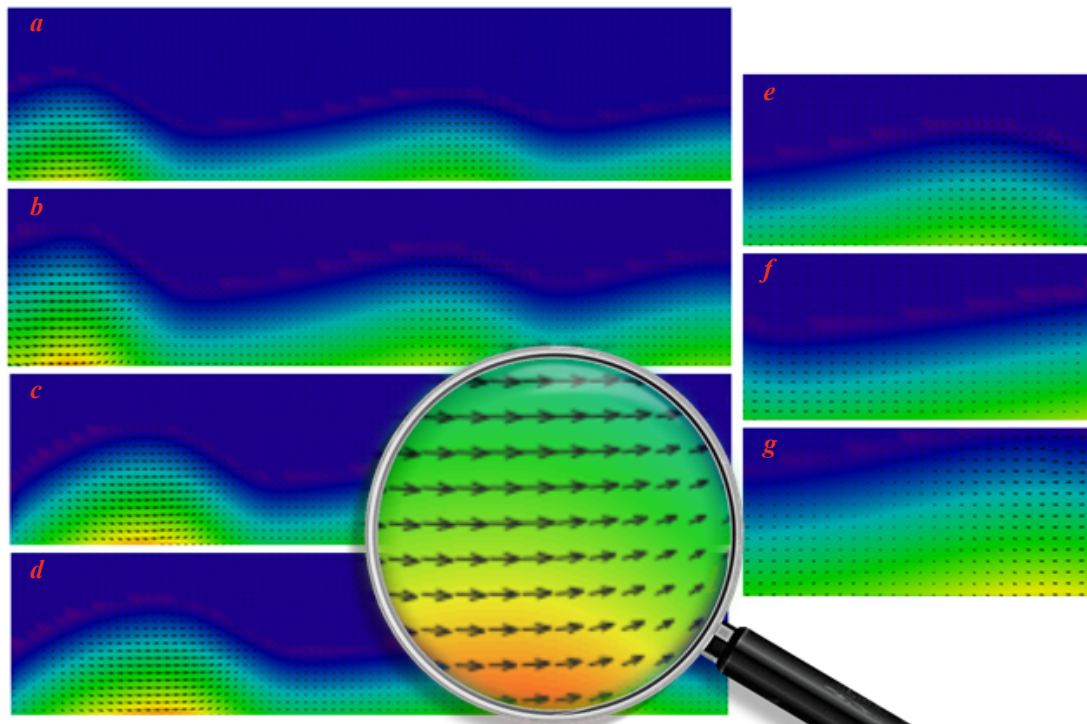


Рис. 5. Профили волн и векторные поля скорости в различные моменты времени, формирование вихревых структур

Разрушение волны характеризуется внезапным переходом от безвихревого течения к вращательному, сопровождающемуся сильным преобразованием энергии волны в турбулентность и, в конечном счете, в тепло. Крупномасштабные когерентные вихри создают сильное вертикальное перемешивание, а турбулентность, создаваемая поверхностным разрушением, распространяется вниз за счет конвекции, однако, относительно небольшая часть энергии волны рассеивается ниже уровня впадины, а большая часть — между гребнем волны и ее впадиной. Относительная высота волны γ ($\gamma = H/h$, где H — высота волны, h — глубина воды) является полезным параметром для характеристики или масштабирования диапазона процессов в зоне прибоя; например, γ используется для прогнозирования начала разрушения волны и интенсивности разрушения. Если относительная высота волны достаточно велика ($\gamma > 0,4$), турбулентность буруна может проникнуть в пограничный слой волны и обрушиться на морское дно (рис. 5).

Хотя разрушение волн является основным источником турбулентности в зоне прибоя, этот процесс лучше всего описать как стохастический. В нерегулярном волновом поле некоторые волны разбиваются, а некоторые — нет, поэтому образование (и рассеивание) турбулентности происходит с большой периодичностью, и мгновенные уровни k могут быть на несколько порядков больше, чем усредненные по фазе волны. Существуют различные типы разрушения волн, поэтому масштаб и интенсивность турбулентных вихрей зависят от типа разрушения.

Когда буруны разливаются, турбулентность распространяется вниз к морскому дну за гребнем волны. Этот процесс вызывает возникновение наклонно нисходящих вихрей (ODE), которые тянутся за гребнем волны. При этом турбулентность создается на фронте волны и медленно распространяется вниз к дну через нисходящие вихри. Когерентные турбулентные структуры обрушиваются на дно на некотором расстоянии позади гребня волны.

Погружающиеся буруны создают большие вихри или нисходящие потоки, которые вращаются вокруг горизонтальной оси, параллельной гребню волны, и генерируют колебания вертикальной скорости.

Обсуждение и заключения. В работе представлены результаты математического моделирования пространственно-трехмерных волновых процессов в мелководных водоемах с учетом особенностей турбулентного обмена. Начальные условия для моделирования задавались на основе обработки данных дистанционного зондирования. Процесс фильтрации натурных данных позволил значительно уменьшить разброс данных и амплитуду колебаний. Доказано разделение волнового потока на приповерхностный макротурбулентный слой, вызванный волновым движением, и нижерасположенный слой с фоновой гидродинамической турбулентностью. Выявлена отличительная особенность воздействия регулярных волн на турбулентный обмен по вертикали.

Список литературы

1. Ferrer, M. A multi-region coupling scheme for compressible and incompressible flow solvers for 2-phase flow in a numerical wave tank / M. Ferrer // *Computer & Fluids*. — 2016. — Vol. 125. — P. 116–129.
2. Martínez-Ferrer, P. J. Improved numerical wave generation for modelling ocean and coastal engineering problems / P. J. Martínez-Ferrer, L. Qian, Z. Ma, D. M. Causon, C. G. Mingham // *Ocean Engineering*. — 2018. — Vol. 152. — P. 257–272.
3. John, M. H. Coastal-Trapped Waves Encyclopedia of Ocean Sciences / M. H. John // Academic Press. — 2019. — P. 598–605.
4. Numerical study on influences of breakwater layout on coastal waves, wave-induced currents, sediment transport and beach morphological evolution / J. Tang, Y. Lyu, Y. Shen, M. Zhang, M. Su // *Ocean Engineering*. — 2017. — Vol. 141. — P. 375–387.
5. Huang, B. Experimental and numerical modelling of wave forces on coastal bridge superstructures with box girders / B. Huang, B. Zhu, S. Cui, L. Duan, J. Zhang // *Ocean Engineering*. — 2018. — Vol. 149. — P. 53–77.
6. Sukhinov, A. I. Mathematical Model of Calculation of Coastal Wave Processes / A. I. Sukhinov, A. E. Chistyakov, E. F. Timofeeva, A. V. Shishenya // *Mathematical Models and Computer Simulations*. — 2013. — Vol. 5, no. 2. — P. 122–129.
7. Sukhinov, A. I. Mathematical Modeling of Sediment Transport in the Coastal Zone of Shallow Reservoirs / A. I. Sukhinov, A. E. Chistyakov, E. A. Protsenko // *Mathematical Models and Computer Simulations*. — 2014. — Vol. 6, no. 4. — P. 351–363.
8. Alekseenko, E. Nonlinear hydrodynamics in a mediterranean lagoon / E. Alekseenko, B. Roux and etc. // *Nonlinear Processes in Geophysics*. — 2013. — Vol. 20, no. 2. — P. 189–198.
9. Debolskaya, E. I. Vertical distribution of a pollutant in river flow: mathematical modeling / E. I. Debolskaya, E. N. Dolgoplova // *Water Resources*. — 2017. — Vol. 44, no. 5. — P. 731–737.
10. Nikitina, A. V. Optimal control of sustainable development in the biological rehabilitation of the Azov Sea / A. V. Nikitina, A. I. Sukhinov, G. A. Ugolnitsky, A. B. Usov // *Mathematical Models and Computer Simulations*. — 2017. — Vol. 9, no. 1. — P. 101–107.
11. Protsenko, S. Mathematical modeling of wave processes and transport of bottom materials in coastal water areas taking into account coastal structures / S. Protsenko, T. Sukhinova // *MATEC Web of Conferences*. — 2017. — Vol. 132.
12. Buzalo, N. Mathematical modeling of microalgae-mineralization-human structure within the environment regeneration system for the biosphere compatible city / N. Buzalo, P. Ermachenko, T. Bock, A. Bulgakov, A. Chistyakov, A. Sukhinov, E. Zhmenya, N. Zakharchenko // *Procedia Engineering*. — 2014. — Vol. 85. — P. 84–93.
13. Chorin, A. J. A numerical method for solving incompressible viscous flow problems / A. J. Chorin // *J. Comput. Phys.* — 1967. — Vol. 2, no. 1. — P. 12–26.
14. Hirt, C. W. Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries / C. W. Hirt, B. D. Nichols // *Journal of Computational Physics*. — 1981. — Vol. 39, no. 1. — P. 201–225.

Поступила в редакцию 07.02.2023.

Поступила после рецензирования 27.02.2023.

Принята к публикации 28.02.2023.

Об авторах:

Елена Анатольевна Проценко, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры математики, ведущий научный сотрудник Таганрогского института имени А. П. Чехова (филиал) Ростовского государственного экономического университета (РФ, 347936, г. Таганрог, ул. Инициативная, 48), [ORCID](#), eapros@rambler.ru

Панасенко Наталья Дмитриевна, научный сотрудник Таганрогского института имени А. П. Чехова (филиал) Ростовского государственного экономического университета (РФ, 347936, г. Таганрог, ул. Инициативная, 48), [ORCID](#)

Стражко Александр Валентинович, научный сотрудник Таганрогского института имени А. П. Чехова (филиал) Ростовского государственного экономического университета (РФ, 347936, Таганрог, ул. Инициативная, 48), [ORCID](#)

Конфликт интересов

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Все авторы прочитали и одобрили окончательный вариант рукописи.

УДК 629.075, 519.5

Научная статья

<https://doi.org/10.23947/2587-8999-2023-6-1-41-52>**Соответствие биофизическим критериям нелинейных эффектов при возникновении каскада бифуркаций Фейгенбаума в моделях инвазионных процессов**А. Ю. Переварюха  

Санкт-Петербургский Федеральный исследовательский центр РАН, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, ул. 14-линия, 39

 madelf@rambler.ru**Аннотация**

Введение. Обсуждается проблема создания комплекса критериев для практически обоснованного вычислительного моделирования ряда сложных биофизических процессов с выраженной стадийностью и критическими трансформациями, например, агрессивных инвазий. Известные модели обладают разнообразным поведением с возникновением бифуркаций по одинаковым сценариям, появлением циклов, сосуществование которых определяется теоремой Шарковского. В пределе усложнения циклического поведения в таких моделях часто сталкиваются с хаотизацией траектории, но при существовании бесконечного числа окон периодичности. Условия бесконечного каскада бифуркаций для итераций определены выполнением условий теоремы Сингера. Цель работы — показать, что большинство связанных сценариями хаотизации нелинейных эффектов не имеют экологической интерпретации предполагаются.

Материалы и методы. Методами оценки устойчивости стационарных состояний и циклических траекторий с применением теоремы Сингера о критерии возникновения бифуркаций для итерационных моделей анализируются связанные между собой нелинейные эффекты. Явления рассмотрены на примере каскадов появления циклов периода $p = 2^i + 1$, $i \rightarrow \infty$ и каскада циклов $p = 2^i - 1$, $i \rightarrow 0$ «удвоения» или «ополовинивания» периода, возникающих в часто применявшихся для оптимизации промысла экологических моделях.

Результаты исследования. На основе модельных и реальных примеров подтверждается, что сосуществование нелинейных эффектов оказывается противоречиво, если результаты моделирования интерпретируются в области биокибернетики. При прогнозировании динамики инвазий или промысла биоресурсов с учетом регулирующего воздействия итерационные модели генерируют ненужные нелинейные режимы поведения, например, в случае известного сценария Фейгенбаума. Установлено, что связанные в один сценарий бифуркации не имеют объяснений в экологической реальности и не отображаются в наблюдаемых биофизических системах. Данные математические артефакты общие для нескольких, очень разных по своим теоретическим основам, биофизическим моделям. Хаотизация в реальной популяционной динамике имеет несколько иные свойства, чем можно получить в каскаде бифуркаций удвоения периода. Более соответствует динамике развития быстрых инвазий образование непротивящего хаотического множества в форме странного репеллера.

Обсуждение и заключения. Показано, что для описания трансформаций биосистемных процессов с внешним воздействием как коллапса промысловой популяции адекватно использовать модели с возникновением альтернативных аттракторов. Данные модели лучше соответствуют переходам между состояниями популяций под действием промысла, чем модели с реализацией каскадов бифуркаций циклов, странных канторовских аттракторов и режимов хаоса в форме континуума неустойчивых траекторий всех периодов. Наиболее перспективны гибридные модели жизненного цикла со стадиями развития для сущностной интерпретации в экологии и прогнозировании биосистем, так как они позволяют определять параметрические диапазоны функционирования, и исключать неприемлемые диапазоны параметров, где возникают избыточные нелинейные эффекты, которые не имеют обоснования для популяционных процессов. Анализ критериев адекватности базируется на сценариях деградации сложно структурированной популяции осетровых рыб бассейна Волги, трески у берегов Канады, всплеск численности инвазионных насекомых и распространению инвазивного гребневика *Mnemiopsis leidy* в Каспийском море.

Ключевые слова: динамические модели инвазий, каскад бифуркации Фейгенбаума, альтернативные аттракторы, сложные динамические процессы, регуляции воздействия для биосистем, гибридные вычислительные системы, параметрические диапазоны, теория сущностной интерпретации.

Благодарности. Автор выражает благодарность профессору Алле Валерьевне Никитиной за дружескую поддержку.

Финансирование. Работа выполнена в рамках Проекта РНФ № 23-21-00339 «Разработка методов сценарного моделирования экстремальных инвазионных процессов в экосистемах с учетом факторов противодействия на основе динамически переопределяемых вычислительных структур».

Для цитирования. Переварюха, А. Ю. Соответствие биофизическим критериям нелинейных эффектов при возникновении каскада бифуркаций Фейгенбаума в моделях инвазионных процессов / А. Ю. Переварюха // Computational Mathematics and Information Technologies. — 2023. — Т. 6, № 1. — С. 41–52.

<https://doi.org/10.23947/2587-8999-2023-6-1-41-52>

Original article

Correspondence to biophysical criteria of nonlinear effects in the occurrence of Feigenbaum bifurcation cascade in models of invasive processes

A. Yu. Perevaryukha  

St. Petersburg Federal Research Center of the Russian Academy of Sciences, 39, 14-Liniya str., St. Petersburg, Russian Federation

 madelf@rambler.ru

Abstract

Introduction. The problem of creating a set of criteria for practically substantiated computational modeling of a number of complex staged biophysical processes with pronounced stages and critical transformations, for example, aggressive invasions, is discussed. Known models have a variety of behavior with the occurrence of bifurcations according to the same scenarios, the appearance of cycles, the coexistence of which is determined by Sharkovskii's theorem. In the limit of complication of cyclic behavior in such models, they often encounter chaotization of the trajectory, but with the existence of an infinite number of periodicity windows. The conditions for an infinite cascade of bifurcations for iterations are determined by the fulfillment of the conditions of Singer's theorem. The purpose of this work is to show that most of the nonlinear effects associated with chaotization scenarios do not have an ecological interpretation, but we will propose ways to exclude non-interpretable parametric ranges.

Materials and methods. Using methods for estimating the stability of stationary states and cyclic trajectories using Singer's theorem on the criterion for the occurrence of bifurcations for iterative models, we analyze interconnected nonlinear effects. The phenomena are considered on the example of cascades of the appearance of cycles of the period $p = 2^i + 1$, $i \rightarrow \infty$ and a cascade of cycles $p = 2^i - 1$, $i \rightarrow 0$ of “doubling” or “halving” the period, which occur in ecological models often used to optimize fishing.

Results. It is confirmed that the coexistence of nonlinear effects turns out to be contradictory if the simulation results are interpreted in the field of biocybernetics, on the basis of model and real examples. Iterative models generate unnecessary non-linear modes of behavior, when predicting the dynamics of invasions or harvesting bioresources, taking into account the regulatory impact, for example, in the case of the well-known Feigenbaum scenario. It has been established that bifurcations connected in one scenario have no explanation in ecological reality and are not reflected in the observed biophysical systems. These mathematical artifacts are common to several biophysical models that are very different in their theoretical foundations. Chaotization in real population dynamics has somewhat different properties than can be obtained in a cascade of period doubling bifurcations. The formation of a non-attractive chaotic set in the form of a strange repeller is more consistent with the dynamics of the development of fast invasions.

Discussion and conclusions. It is shown that to describe the transformations of biosystemic processes with external influence, as the collapse of a commercial population, it is adequate to use models with the emergence of alternative attractors. These models correspond better to the transitions between the states of populations under the influence of

fishing than models with the implementation of cascades of bifurcations of cycles, strange Cantor attractors and chaos regimes in the form of a continuum of unstable trajectories of all periods. The most promising are hybrid models of the life cycle with developmental stages for essential interpretation in ecology and forecasting of biosystems, as they allow to determine the parametric ranges of functioning and exclude unacceptable ranges of parameters where excessive non-linear effects occur, which have no justification for population processes. The analysis of the adequacy criteria is based on degradation scenarios for a complexly structured sturgeon population in the Volga basin, cod off the coast of Canada, outbreaks of invasive insects, and the spread of the invasive ctenophore *Mnemiopsis leidyi* in the Caspian Sea.

Keywords: dynamic models invasive processes; Feigenbaum bifurcation cascade; alternative attractors; complex dynamic processes, impact regulation for biosystems, hybrid computing systems, parametric ranges, theory of essential interpretation.

Acknowledgements. Gratitude towards Professor Alla Valeryevna Nikitina for friendly support

Funding information. The work was carried out within the framework of the Russian Science Foundation Project No. 23-21-00339 “Development of methods for scenario modeling of extreme invasive processes in ecosystems, taking into account counteraction factors based on dynamically redefined computational structures”.

For citation. Perevaryukha, A. Yu. Correspondence to biophysical criteria of nonlinear effects in the occurrence of the Feigenbaum bifurcation cascade in models of invasive processes / A. Yu. Perevaryukha // Computational Mathematics and Information Technologies — 2023. — Vol. 6, no. 1. — P. 41–52. <https://doi.org/10.23947/2587-8999-2023-6-1-41-52>

Введение. Для задач биологической кибернетики последовательно развивается метод организации базовой модели для анализа вариативности сценариев, быстро меняющихся процессов с пороговыми эффектами [1]. Нелинейные эффекты могут возникать в сугубо прикладной задаче прогнозирования ожидаемой величины ежегодного пополнения популяций, рассматриваемых с точки зрения эксплуатации биоресурсов. Базовые разработанные вычислительные модели были направлены на анализ воспроизводства каспийской севрюги после перекрытия нерестилищ. Модели реализовывались в форме системы уравнений, описывающей взаимосвязанные скорости убыли численности исходной генерации особей и средних темпов роста групп, которые формируют новое поколение. Используя вспомогательные уравнения как надстройку над гибридной структурой, в модели получилось учесть эффект быстрого увеличения скорости роста особей и дальнейшей его остановки при переходе к созреванию.

Прогнозирование поступления в промысловый запас новой последовательности смежных поколений, которые, по разным независимым факторам, могут оказаться существенно различной численности — ключевая задача ведения преосторожного промысла. В работе был использован метод расчета стадий развития и корректировки коэффициентов убыли, которые применяются в уравнении от самого первого этапа жизни, где численность исходного поколения предполагается $N(0)$. Этот момент трактуется как событие выхода личинок морских рыб или крабов из икринок. Динамика последовательного уменьшения исходной генерации описывается дифференциальным уравнением первого порядка, но с переопределяемой структурой правой части. Для фиксации переопределения схемы расчетов задается пространство событий на кадрированном по номерам событий замкнутом промежутке времени $[0, T]$.

Явление сокращения ежедневной убыли происходит последовательно на стадиях развития. В структуре базовой модели учитываются разные ключевые факторы смертности и уменьшения темпов убыли при взрослении. Предикативно-переопределяемая гибридная структура модели записывается так:

$$\frac{dN}{dt} = \begin{cases} -(\alpha w(t)N(t) + U[x]\beta)N(t), & t < \tau \\ -(\alpha_1 N(\tau) / w(\tau) + \beta)N(t), & t > \tau, \quad w(t) < w_{D2}, \\ -\alpha_2 w(t)N^2(t), & w(t) < w_{D3}, \end{cases} \quad (1)$$

где корректируемый по стадиям развития α — определенный плотностью коэффициент смертности от истощения жизненных ресурсов; β — коэффициент всегда присутствующей убыли от множества естественных факторов, которые не связаны с плотностью.

Концепция «репродуктивного потенциала» считается абстрактной для экологических моделей реального промысла и искусственного восполнения запасов. Есть основания полагать, что разумно перейти к естественному показателю средней плодовитости λ . Этот показатель можно оценивать по данным мониторинга, который проводился на основе исследований нереста рыб в бассейне Волги и Дона. Плодовитость задаст начальные условия для расчета первой формы правой части $N(0) = \lambda S$. Указанный в (1) промежуток τ — длительность первой стадии с эндогенным питанием. Это важный интервал для всех анадромных рыб. Для модели необходимы условия останковки расчетов. Используется показатель w_D — условный уровень развития. В расчетах модели при достижении w_D меняется выраженность факторов смертности. Экологически обусловленная корректировка параметров интерпретируется сменой мест обитания молоди в реке и избеганием хищников при уже самостоятельной миграции к морскому ареалу обитания.

Севрюга Каспия поддерживалась искусственно. При выращивании осетровых рыб в переполненных прудах с высокой плотностью (это называется термином «зарыбление») вместо величины $w(\tau)$ в знаменателе для определенной формы было установлено действие запаздывания на финальной стадии развития $N(t - \zeta)$.

Важную роль выполняет динамически переопределяемый коэффициент $U[x]$. В (1) включена триггерная, динамически корректируемая функция, но с ограниченной областью для ее значений. Идея корректировать функцию у смежных поколений — это способ отразить влияние экстремальных условий. Часто, при прогнозировании успеха размножения или особых состояний биосистем, сталкиваются с пороговыми трансформациями, как в сценарии деградации структурированной по нерестовым группам популяции крупного хищника, камчатского краба у берегов Кадьякского архипелага в водах Аляски.

Цель данной статьи — определить, какие именно нелинейные эффекты из всего их многообразия в динамике траекторий биологических моделей стоит игнорировать при обсуждении результатов расчетов, а какие исключают описательные возможности при обсуждении экологических результатов. На основе полученных результатов можно решать задачи по адекватному истолкованию результатов вычислительного моделирования ситуаций, которые возникают при развитии инвазионных процессов и коллапсов биоресурсов. Задача моделирования состоит в поддержке принятия управляющих решений при регулировании воздействия на биосистемы, для чего проводится оценка состояния биосистем, но где не все параметры непосредственные характеристики видов. Задача практического применения моделей — найти узкие диапазоны параметров, которые не подходят для обоснования принятия решений.

Материалы и методы. Исходя из того, что жизненный цикл стандартной длины и у рыб, и у насекомых сопровождают структурные превращения, в гибридной структуре представлен метод диверсификации жизненного цикла по фиксированному набору этапов и уравнений модели для каждого этапа.

В данном исследовании используется оригинальная разновидность непрерывно-дискретной модели со специальной организацией времени. Проводится кадровое разбиение времени онтогенеза вида и создается иерархия вложенных непрерывных отрезков времени, концами которых будут дискретные события различных типов, что важно для анализа стадий инвазий видов.

Внутри общего промежутка для жизненного цикла создан перечень из пронумерованных событий, где, в зависимости от типа, используется верхний или нижний индекс в обозначении. Разбитое на кадры интервальное событийно-гибридное время формализуется с мультимножеством из упорядоченных элементов, объединенных в кортежи, число которых соответствует поколениям:

$$\bigcup_n \left\{ \partial L_n, \left\{ \bigcup_i [t_0, t^i, t^{i+1}, T] \right\}_n, \partial R_n \right\},$$

где нижними индексами заданы номера событий в фиксированном интервале общего промежутка времени, а верхними — начальные события каждого кадра.

В гибридно-событийном формате, у модельного времени с событиями, число n указывает номер кадра в перечне всех поколений. Запись времени с событийными компонентами оставляет исключенные из последовательности модельных кадров пограничные щели, имеющие служебное назначение в численных расчетах. В модификациях для инвазионных видов в новой среде целесообразно указывать кадры времени с плавающими границами, которые заданы функциями роста.

Модель с гибридным временем рассчитана на применение инструментальной среды моделирования, обладающей библиотекой численных методов с изменяющимся шагом интегрирования. Принципы анализа модели составят теория динамики итераций, имеющих экстремумы функций со шварцианом переменного знака (согласно работам Сингера и Шарковского).

Помимо использования гибридной модели (1), для описания ситуации коллапса запасов камчатского краба, гибридную структуру удалось привести к прогнозированию других сложных стадийных биофизических процессов — вспышек инвазионных видов и распространения новых инфекций. Проведено построение вычислительной модели для специфической ситуации в динамике опасных инвазионных насекомых, вызывающих пилообразные вспышки численности.

В рассматриваемом сценарии темпы весового прироста указаны в обратной зависимости от средней численности новой генерации особей. Однако невозможно использовать обратно пропорциональный метод. Для этого была выбрана форма дробно-степенной зависимости. Эта функция действует до перехода на активное питание. Повышенная убыль в этот период времени появляется из-за увеличения потребности в калориях для личинок с низкой подвижностью. Следует отметить, что инвазионные виды отличаются особенностями развития.

Модельная динамика численности генерации для инвазионного вида $N(t)$ на интервале событийного модельного времени рассчитывается объединенными в систему уравнениями с явной триггерной функцией:

$$\begin{cases} \frac{dN}{dt} = -(\alpha w(t)N(t) + \Theta(S)\beta)N(t), \\ \frac{dw}{dt} = \frac{g}{\sqrt{N^k(t) + \zeta}}, \end{cases} \quad (2)$$

где S — величина нерестовой части промыслового запаса; $w(t)$ — фиксированное значение для размерного развития генерации; g — временно константный параметр, учитывающий ограниченность количества доступных калорий; ζ — параметр, ограничивающий темп развития вне зависимости от $N(t)$; λ — средняя плодовитость нерестовой части промыслового запаса, определяющая начальные условия расчета (1) как $w(0) = w_0$, $N(0) = \lambda S$; α и β — мгновенные коэффициенты убыли. Расчеты проводятся для времени онтогенеза, определяемого как «интервал уязвимости». Это специфичный для каждого вида отрезок времени.

Для агрессивных инвазионных видов этот интервал зависит от условий сопротивления среды и времени адаптации биотического окружения.

При незначительном количестве повторно размножающихся особей численно из (2) находится величина нерестовой части промыслового запаса $S = N(T)$. Учет дополнительного размножения приведет к формированию вектора из компонентов нерестующих поколений. Тогда нужно рассчитать исходную генерацию так: $N(0) = \lambda_1 S_1 + \dots + \lambda_i S_i$. Для задачи моделирования инвазии насекомых вредителей выберем альтернативную ситуативную функцию триггерного действия: $\Theta(S) = 1 + \exp(-cS^2)$, $\lim_{S \rightarrow \infty} \Theta(S) \rightarrow 1$. Цель этой функции — отразить действие известного эффекта агрегированной группы, что важно для инвазионных процессов. Чужеродные опасные вредители, проникшие в новый ареал, генерируют локальную вспышку при переходе критического порога их численности. Тогда высокая активность проявляется в форме повторяющихся пиков [2]. Для модели предложена вычислительная система — предикативно переопределяемая гибридная структура уравнений с запаздыванием.

Биокибернетика развивает методики активного вмешательства и подавления инвазионных процессов. Регулируемое противодействие агрессивно размножающемуся виду в биологическом сообществе вырабатывается с запаздыванием. Ситуация приводит к резкому переходу в фазу депрессии численности вселенца. Для остановки распространения вредоносного инвазивного вида проводится специальная интродукция вида-антагониста, но эффективность такого метода подавления на практике непостоянная.

Модель исследуется при представлении вычислительного сценария с набором параметров, начальных значений и алгоритмом выработки решений об изменении воздействия для дискретного времени. С использованием вычислительных экспериментов можно описать реальный сценарий исхода для ситуации, которая приводит к коллапсу биофизическую систему при контролируемом уровне воздействия. Модельный сценарий в работе [3] задает логику принятия управленческих решений по изменению уровня внешнего давления на естественную

популяцию. Моделирование показало, что переход процесса в колебательный режим приводит к выбору рискованного режима управления. Также было установлено, что динамика реальных водных популяций имеет точку порогового сокращения эффективности восполнения биоресурсов, которую невозможно предсказать, опираясь на данные статистики.

Результаты исследования. Ранее разработанный авторами модельный сценарий для коллапса камчатского краба Аляски использует трансформации фазового портрета итераций, которые получили обоснование на графиках с данными. При наличии несвязных границ областей притяжения альтернативных аттракторов и странного хаотического репеллера приводят к тому, что из-за хаотических режимов в детерминированной модели возникают эффекты неопределенности.

В результате последовательного численного решения уравнений определяется динамическая структура, где дискретная составляющая траектории «гибридной» непрерывно-дискретной модели исследуется в вычислительной среде как итерация отображения с несколькими экстремумами. Модели с гибридным временем рассчитаны на сценарное исследование с учетом логики принятия регулирующих воздействий на биосистемы решений, которую применяют эксперты. Для описанного ранее поведения траектории гибридной модели в виде переходной хаотизации и изменения границ областей притяжения аттракторов удалось подобрать экологическую интерпретацию на примере коллапсов трех популяций осетровых рыб Каспия.

Свойства описанного в [3] модельного сценария для эксплуатируемых водных биоресурсов с хаотическим режимом динамики подтверждаются автором на примере вылова океанических видов ракообразных. Итерационные модели подчиняются фундаментальным теоремам нелинейной динамики, что составляет сущность проблемы их применения в управлении биосистемами. Можно предположить, что нелинейный эффект (бифуркация, кризис аттрактора или стохастическое размытие для сепаратрисы) гипотетически интересен для описания популяционных процессов. Однако нельзя исключить ситуацию, что эффекту сопутствует и другой метаморфоз фазового портрета, для которого невозможно подобрать никакого биологического объяснения.

Применяемые экспертами при формировании управляющего воздействия методы прогнозирования и оценки состояния биосистемы требуют отдельного анализа. В экспертных методиках экологии построение регрессионных моделей и поиск корреляционных взаимосвязей происходит на основании данных мониторинга. Для построения кривых зависимости в репродуктивном процессе инвазионных видов, которые включают величины R в зависимости от нерестового запаса S , предлагались преобразования исходных данных мониторинга и построение регрессионных кривых. В [5] для прогнозирования динамики популяций автор предложил функцию оценки эффективности воспроизводства:

$$f(S) = aS \exp(-bS), \quad (3)$$

которую затем логарифмировал следующим образом:

$$\ln R - \ln S = \ln a - bS. \quad (4)$$

и построил кривую с использованием регрессии $\ln R / S$ на S для геометрической и арифметической средней. Метод не может предсказывать колебаний с большой амплитудой, так как точки должны были бы сгруппироваться в некотором радиусе от пересечения с биссектрисой координатного угла [6].

Движение точек траектории во времени для динамической системы в диссипативном случае представляется движением в фазовом пространстве к аттрактору, подмножеству фазового пространства $A \subseteq M$, инвариантному относительно эволюции: $\psi^{(t)}(A) = A$ для всех $t \in T$. Также существует окрестность U множества A , в которой для всех $y \in U$ выполняется $\lim_{t \rightarrow \infty} \psi^{(t)}(y) = A$. В случае используемых динамических систем выделяют три топологические разновидности аттракторов [7]. Регулярным аттрактором для отображения интервала $\Psi: I \rightarrow I$ считается состояние равновесия с неподвижной точкой x^* : $\lim_{t \rightarrow \infty} \psi^{(t)}(y) = x^*$ и устойчивый цикл. Для биологии этот режим периодических автоколебаний можно считать выраженным приблизительно периодическими флуктуациями, когда период может «плавать» в некотором диапазоне.

В дискретно-непрерывных моделях гибридного типа наблюдается серия касательных бифуркаций с появлением устойчивых циклов периодов [8] $p \neq 2^i$ при последовательном увеличении, начиная с $a_1 = e^2$. В том случае, если одномерное отображение $R_{j+1} = \psi(R_j)$ при значении управляющего параметра $a = \hat{a}$ имеет цикл периода

$p = 3$, то оно при этом же значении управляющего параметра $a = d$ имеет бесконечное множество циклов всех других периодов. А. Н. Шарковский [9] доказал, что если отображение $\Psi: I \rightarrow I$ имеет цикл $p = n$, то $\Psi: I \rightarrow I$ также имеет циклы со всевозможными периодами при этом же значении управляющих параметров, предшествующими числу $p = n \in \mathbb{N}^+$ среди целых чисел, выписанных в специальном порядке, который завершает число 3 [10].

Найденный в расчетах цикл «три» означает периодическое окно среди хаотических вариантов динамики. Следовательно, появление цикла периода «три» странно для биологической модели.

С целью установить нужные для биологической модели свойства выбрана функциональная итерация класса гладкости C^2 отрезка прямой R^1 , которая задается функцией $f(x)$. Данная экологическая функция будет интерпретироваться как связь между нерестовым стадом и образовавшимся пополнением. Пусть неподвижная точка отображения зависит от используемых при прогнозировании состояния биоресурсов коэффициентов:

$$x^* = x^*(a, b), \text{ но } f'_x(x^*) = p(a), f'_x \neq 0, \text{ если } x \neq c, f''(c) \neq 0.$$

В рассмотренном выше примере для зависимости $f(x; x \neq c)$ всюду определен дифференциальный инвариант, знак которого сохраняется для всех итераций:

$$S_f = \frac{f'''(x)}{f'(x)} - \frac{3}{2} \left(\frac{f''(x)}{f'(x)} \right)^2.$$

В случае функции (1) существуют следующие свойства:

$$\begin{aligned} f'(x) &= ae^{-bx}(1-bx), \\ f''(x) &= abe^{-bx}(bx-2), \\ f'''(x) &= ab^2e^{-bx}(3-bx). \end{aligned}$$

В общем виде n -ая производная выражается: $f^{(n)}(x) = a(-1)^n b^{n-1} e^{-bx}(bx-n)$

Знак дифференциального инварианта для всех итераций будет выглядеть так: $f(f(\dots(x)\dots)) \equiv f^n(x)$. Очевидно, что свойство $S_f < 0$ сохраняется $x \in \mathfrak{R}$, так как для $f(S) = aS \exp(-bS)$ выражение примет вид:

$$S_f = b^2 \frac{-b^2 x^2 + 4bx - 6}{2(1-bx)^2}.$$

Положение стационарной точки для функции (1) зависит от двух параметров (критерий устойчивости — однопараметрическая функция), а x^* теряет устойчивость:

$$f'(x^*) = -1, \text{ где критерии устойчивости}$$

$$f'(x^*) = ae^{-b \frac{\ln a}{b}} - b \frac{\ln a}{b} ae^{-b \frac{\ln a}{b}} = \frac{a(1 - \ln a)}{e^{\ln a}} = 1 - \ln a.$$

При $a = e^2, f'(x^*) = -1$ для второй итерации $f^2(x)$ свойства в теряющей устойчивость стационарной точке x^* :

$$\frac{df^2(x^*)}{dx} = 1,$$

$$\frac{d^2 f^2(x)}{dx^2} = \frac{df'(f(x))f'(x)}{dx} = f''(f(x))(f'(x))^2 + f'(f(x))f''(x),$$

$$\frac{d^2 f^2(x^*)}{dx^2} = f'(x^*)f''(x^*)(f'(x^*) + 1) = 0.$$

В данном случае показатель шварциана у второй итерации всегда тождественен третьей производной в этой точке:

$$S_{f^2(x^*)} = \frac{d^3 f^2(x^*)}{dx^3}.$$

Каскад бифуркаций удвоения периода цикла с соответствующими периодическими окнами реализуется бесконечно, если для знака шварциана выполняется $S_f < 0$. Тогда $df^2(x)/dx$ при ae^2 имеет в x^* локальный максимум и только тогда происходит бифуркация с появлением у старшей итерации двух новых точек пересечения, причем $S_f < 0$ — критерий реализации бесконечного каскада бифуркаций, указанного Митчеллом Фейгенбаумом удвоения периода цикла.

Хаотизация через каскад Фейгенбаума является следствием фундаментальной теоремы из [11], где установлено что отображение унимодальной функции с $S_f < 0$ может иметь не более одной устойчивой траектории, и данная траектория является ω -предельным множеством для экстремума $c: f'(c) = 0$. Проблема в том, что для биосистем этот каскад часто возникает в моделях, но реальными данными он не обоснован.

Модель биокibernетики (3), с математической точки зрения, классифицируется как SU -отображение. Модель (1) отличается от объектов, исследованных М. Фейгенбаумом в работах по универсальности и теории ренормализации, наличием точки перегиба $f''(x_s) = 0, x_s = 2/b$ и точек, где обращаются в ноль все старшие производные. Свойство $\lim_{x \rightarrow \infty} f(x) \rightarrow 0$ для (1) означает, что хаотический аттрактор может увеличиваться неограниченно, так как не возникнет явления «граничный кризис аттрактора».

Часто на практике применяют иную функцию воспроизводства как альтернативную модель теории формирования поколений биоресурсов с предельной биомассой промыслового запаса K и степенью b знаменателей:

$$f(x) = \frac{ax}{1 + \left(\frac{x}{K}\right)^b}, \quad (5)$$

где $a > 1$ интерпретируется как репродуктивный потенциал, K — величина экологической ниши и ограниченной лимитирующей емкости среды. Степень воздействия экологического лимитирования со стороны среды в (5) определяется b . Была проанализирована итерация модели (5) с точки зрения теории бифуркаций отображений на R^1 . Точка равновесия для итераций (5) имеет свойства:

$$\begin{aligned} x^* &= K \sqrt[b]{a-1}, \\ \frac{df(x)}{dx} &= \frac{(K^b + x^b)aK^b - ab(Kx)^b}{(K^b + x^b)^2}, \\ \frac{df(x^*)}{dx} &= \frac{a - ba + b}{a} > 0 \text{ при } b < 1. \end{aligned}$$

В вычислительных экспериментах на основе определения знака показателей Ляпунова установлено наличие хаотических свойств для итераций (5). В ограниченном диапазоне значений параметра a , которые можно применить к инвазионным популяциям, бифуркации удвоения периода возникают при изменении b . При $b < 1$ экстремумов у функции нет, при $b = 2$ функция имеет критическую точку $x = K$. Производная 2-го порядка в критической точке:

$$\frac{d^2 f(x)}{dx^2} = -\frac{a}{4K},$$

Так, (5) имеет максимум при данных условиях. В случае (5) исследуется параметрическая зависимость для аналитического анализа бифуркаций с достаточно гибкими свойствами. Можно избежать каскада, а также дополнительных нелинейных эффектов, внутренних кризисов хаотического аттрактора, окон периодичности и перемежаемости. Все эти явления тут можно аккуратно исключить из моделирования биосистем, оставив только нужные циклы.

Биофизическая и промысловая интерпретация нелинейных эффектов в этих двух моделях взаимно исключают их адекватность. Рассмотрев изменение поведения модели (3), можно сформулировать гипотезу «репродуктивной сложности». Якобы увеличение репродуктивного потенциала в биосистеме приводит к появлению флуктуаций численности, что в пределе выражается колебаниями аperiодического характера. Однако такие колебания должны в среднем иметь возрастающую амплитуду. Соответственно, усредненный минимум хаотических колебаний (среднее значение минимальной точки за период) будет стремиться к нулю. Для биосистем это означает деградацию и разрушение. В альтернативной модели возникновение каскада циклов периода 2^n происходит при увеличении степени действия лимитирующих факторов среды.

Одна из двух моделей всегда будет принципиально неадекватна. Альтернативная гипотеза сущностной биофизической интерпретации в том, что каскад бифуркаций (как и ряд других сложных нелинейных эффектов и внутреннего и граничного кризиса хаотического аттрактора с явлением перемежаемости) для SU -отображений не имеет биофизической интерпретации.

Обсуждение и заключения. Необходимо отметить, что для ряда моделей существуют сопутствующие нелинейные эффекты, которые по ряду причин нежелательны и излишни. Такие эффекты не находят подтверждения в анализе данных наблюдений и их нужно исключать из обсуждения.

Популяционная цикличность — интереснейший, многообразный и далеко не полностью исследованный биологический феномен. Цикличность наблюдается и в лабораторном аквариуме при постоянстве условий, и в открытом океане (в том числе климатически обусловленная). Научная проблема установления физических причин возникновения длиннопериодических колебаний у многих видов далека от разрешения. Исследования в этой области продолжают международные коллективы. Стоит отметить некоторые не совсем очевидные аспекты проблемы описания цикличности, интересные с точки зрения системного анализа.

Популяционные циклы (пусть и не в строго периодическом математическом смысле замкнутой траектории) могут быть краткие (недельные) в лабораторных условиях. Существуют примеры длинных, даже вековых периодов колебаний, не соотносящихся с длиной жизненного цикла самого вида. Экстремальное, по своим последствиям для лесных экосистем, явление происходит со знаменитыми колебаниями численности вредителя еловой листовёртки *Choristoneura fumiferana* в лесах Северной Америки от Атлантического до Тихого океана.

Так как явление популяционных циклов хорошо описано у многих видов, то моделировать цикличность, свойственную ряду природных популяций, пробовали различными математическими методами, дискретными и непрерывными моделями. Возможность получения циклического поведения для простой модели вида $x_{n+1} = \psi(x_n; a)$ позитивно оценивается многими авторами. Однако циклы, возникающие при увеличении параметра a , отличаются не только периодом, но и порядком обхода составляющих их точек, то есть циклы у итераций с одинаковым по длине (количеству составляющих цикл точек) периодом могут быть качественно разные — это одно из отличий поведения дискретных моделей.

На рис. 1. показана циклическая траектория $x_{n+1} = ax_n \exp(-bx_n)$, состоящая из четырех точек. В сценарии вычислений между крайними верхней и нижней точками цикла оказались две другие точки цикла. Полученный в вычислительном эксперименте порядок обхода четырех циклических точек, когда траектория переходит из верхней ветви в нижнюю, универсален на всем протяжении каскада. После удвоения точки появляются симметрично в верхних и нижних ветвях вплоть до резкого слияния всех «раздвоившихся» ветвей циклических точек в канторовский аттрактор. Порядок обхода ветвей, которые формируют циклические точки, теряется только с формированием канторовской структуры после объединения ветвей, которые образовались при первом удвоении периода.

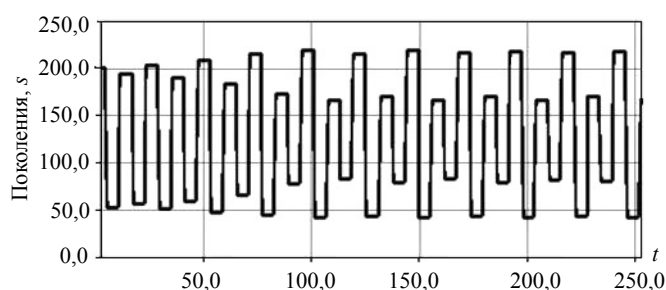


Рис. 1. Циклическая динамика модели (3) периодом цикла «четыре»

Установление свойств образования циклов было воспринято позитивно ввиду подтверждения предсказательных возможностей таких моделей для популяций с неперекрывающимися поколениями. Подобное мнение продолжает существовать, несмотря на доказательство универсального характера таких бифуркаций для унимодальных функций.

Циклические изменения плотности характерны для мелких млекопитающих арктических островов и часто у них наблюдались, но циклы не сохраняются и легко разрушаются любым внешним возмущением [12]. Помимо длины периода p , циклы итераций $x_{n+1} = \psi(x_n)$ различаются между собой взаимным расположением составляющих их точек при обходе. На типичном примере динамики арктического грызуна видим, что популяционные циклы — монотонные перестановки с возрастанием (рис. 2). Основной пик у грызунов приходится на конец четырехлетнего периода колебаний численности грызунов, и такие циклы с максимумом в конце можно получить в порядке теоремы Шарковского, но другими математическими методами.

На примере более длинных циклов степных грызунов в современном Казахстане очевидно, что существует стадия минимума численности, стадия быстрого роста и пика, которая сменяется продолжительной депрессией с минимальным состоянием. Для многих насекомых-вредителей наблюдаются затухающие «пилообразные» серии пиков численности [13].

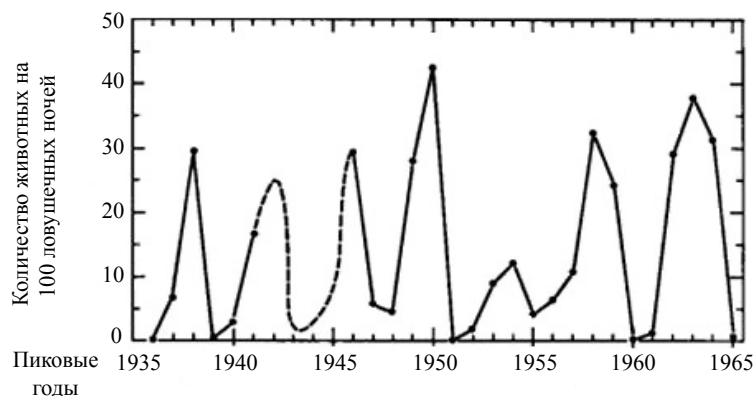


Рис. 2. Четырехлетняя цикличность в динамике популяции арктических млекопитающих по данным мониторинга [12]

Серии популяционных всплесков — это тоже форма циклических изменений, но такая динамика не отражается дискретными итерационными моделями. Серии колебаний получили описание на основе непрерывных моделей с запаздыванием в работе [14].

Биофизические модели в природопользовании, не учитывающие эффект агрегированной группы (или фактор наличия критической низкой численности сообщества), практически выходят за рамки возможности интерпретации результатов моделирования в экологии. Есть ряд других примеров, где принципы экологии не согласуются со свойствами математического аппарата [15]. Известно, чем больше видов в экосистеме, тем она стабильнее [16], что означает способность продолжительное время сохранять неизменным свое состояние [17]. Но при увеличении размерности фазового пространства математических моделей только усложняется возможность поведения траектории.

Задачи регулирования биофизических процессов становятся только сложнее из-за непредвиденных возмущений, потому актуально развитие вычислительных методов анализа нелинейности ситуаций с описанием логики воздействия. Эволюционно сложившиеся долгие режимы функционирования трофических цепей, к которым относятся регулярные циклы популяций, разрушаются без поддержания видового разнообразия [19]. Избыточная эксплуатация ценных популяций нарушает регуляторные механизмы, поддерживающие баланс соотношения видов, что приводит к занятию экологической ниши вредными вселенцами и распространению инвазивного гребневика *Mnemiopsis leidy* [20].

Относительное положение экстремумов у функций, которые используют для связи основных величин репродуктивного процесса относительно стационарных точек — важная характеристика для динамики, так как влияет на характер границ областей притяжения аттракторов и возникновения альтернативных циклов. Для найденных сценариев перехода к аperiodической динамике и обратно к регулярной еще не разработано обобщенного строго математического описания в объяснении свойств перехода к хаосу.

Ошибки при оптимизации влекут явление структурного коллапса, которое нужно своевременно определять по характерным признакам. Оптимизация для экономики регионов несет риск, согласно теории максимального поддерживаемого изъятия, реализуемого в течение неопределенного периода времени в практике ее применения и для популяций. Коллапс запасов означает долгую остановку промысла и депрессию отрасли экономики. Регулируемый промысел ведет к неожиданной деградации биоресурсов достаточно часто. Математически это отражает случай, когда неустойчивое равновесие в модели представляется точкой-репеллером. В экологической реальности инвазионных процессов это размытая область, а не точка [21], так как результируется действие стохастических факторов, которые невозможно учесть непосредственно.

Сложность управления биосистемами при неопределенности стохастического воздействия в том, что кризисные ситуации разнообразны в ключевых признаках и вызываются часто непредвиденными факторами гидрологии. Подобные примеры моделей показаны в исследованиях А. В. Никитиной [22] для анализа воздействия чужеродной инвазивной биоты, активно поражающей сложившиеся в долгой изоляции донные биосистемы Азовского и Каспийского морей [23] из-за строительства каналов и активного судоходства.

Список литературы

1. Perevaryukha, A. Y. An iterative continuous-event model of the population outbreak of a phytophagous hemipteran / A. Y. Perevaryukha // *Biophysics*. — 2016. — Vol. 61, no. 2. — P. 334–341.
2. Robeva, R. The spruce budworm and forest: a qualitative comparison of ODE and Boolean models/ R. Robeva, D. Murrugarra // *Letters in Biomathematics*. — 2016. — Vol. 3, iss. 1. — P. 72–92.
3. Perevaryukha, A. Y. Hybrid model of the collapse of the commercial crab *Paralithodes camtschaticus* (Decapoda, Lithodidae) population of the kodiak archipelago / A. Y. Perevaryukha // *Biophysics*. — 2022. — Vol. 67, no. 2. — P. 300–319.
4. Березовская, Ф. С. Бифуркации бегущих волн в популяционных моделях с таксисом/ Ф. С. Березовская, Г. П. Карев // *Успехи физических наук*. — 1999. — № 9. — С. 1011–1025.
5. Ricker, W. Stock and recruitment / W. Ricker // *Journal Fisheries research board of Canada*. — 1954. — No. 11. — P. 559–623.
6. Perevaryukha, A. Y. A model of development of a spontaneous outbreak of an insect with aperiodic dynamics / A. Y. Perevaryukha // *Entomological Review*. — 2015. — Vol. 95, no. 3. — P. 397–405.
7. Guckenheimer, J. Sensitive dependence on initial conditions for one dimensional maps / J. Guckenheimer // *Communications in Mathematical Physics*. — 1979. — Vol. 70. — P. 133–160.
8. Feigenbaum M. J. Universal behavior in nonlinear systems / M. J. Feigenbaum // *Physica*. — 1983. — Vol. 7, no. 1–3. — P. 16–39.
9. Sharkovskii, A. N. Coexistence cycles of continuous map of the line into itself / A. N. Sharkovskii // *International Journal of Bifurcation & Chaos*. — 1995. — Vol. 5. — P. 1263–1273.
10. Шарковский, А. Н. О притягивающих и притягивающихся множествах/ А. Н. Шарковский // *Доклады АН СССР*. — 1965. — Т. 160. — С. 1036–1038.
11. Singer, D. Stable orbits and bifurcations of the maps on the interval / D. Singer // *SIAM Journal of Applied Mathematics*. — 1978. — No. 35. — P. 260–268.
12. Krebs, C. J. Population Cycles in Small Mammals/ C. J. Krebs // *Advances in Ecological Research*. — 1974. — Vol. 8. — P. 267–399
13. Royama, T. Analysis of spruce budworm outbreak cycles in New Brunswick, Canada, since 1952 / T. Royama, W. E. MacKinnon, E. G. Kettela, N. E. Carter, L. K. Hartling // *Ecology*. — 2005. — Vol. 86. — P. 1212–1224.
14. Perevaryukha, A. Y. A continuous model for oscillating outbreaks of the population of a phytophagous moth, the tent caterpillar, *Malacosoma disstria* (Lepidoptera, Lasiocampidae) / A. Y. Perevaryukha // *Biophysics*. — 2020. — Vol. 65, no. 1. — P. 118–130.
15. Courchamp, F. Allee Effects in Ecology and Conservation / F. Courchamp, B. Ludek, J. Gascoigne // *Oxford University Press : New York*. — 2008. — 266 p.
16. Братусь, А. С. Динамические системы и модели биологии/ А. С. Братусь, А. С. Новожилов, А. П. Платонов. — Москва : ФИЗМАТЛИТ, 2010. — 400 с.
17. Базыкин, А. Д. Модель экосистемы трех трофических уровней с учетом существования нижней критической плотности популяции продуцента /А. Д. Базыкин, Е. А. Апонина // *Проблемы экологического мониторинга и моделирования экосистем*. — 1981. — Т. 4. — С. 186–203.
18. Perevaryukha, A. Y. A continuous model of three scenarios of the infection process with delayed immune response factors / A. Y. Perevaryukha // *Biophysics*. — 2021. — Vol. 66, no. 2. — P. 327–348.
19. Veshchev, P. V. Efficiency of natural reproduction of sturgeons in the Lower Volga under current conditions / P. V. Veshchev, G. I. Guteneva // *Russian Journal of Ecology*. — 2012. — Vol. 43, no. 2. — P. 142–147
20. Perevaryukha, Y. N. Comparative immunochemical analysis of intraspecies distinctions of serum proteins of starred sturgeon *Acipenser stellatus* (Acipenseriformes, Acipenseridae) from the Caspian basin / Y. N. Perevaryukha, P. P. Geraskin, T. Y. Perevaryukha // *Journal of Ichthyology*. — 2011. — Vol. 51, no. 5. — P. 392–397.
21. Дубровская, В. А. О критериях обоснованности для анализа нелинейных эффектов в моделях эксплуатируемых популяций / В. А. Дубровская // *Проблемы механики и управления: Нелинейные динамические системы*. — 2016. — № 48. — С. 74–83.

22. Никитина, А. В. Моделирование динамики численности рыбных популяций в акватории Таганрогского залива / А. В. Никитина // Известия Южного федерального университета. Технические науки. — 2009. — № 7. — С. 169–173.

23. Nikitina, A. V. Optimal control of sustainable development in the biological rehabilitation of the Azov Sea / A. V. Nikitina, A. I. Sukhinov, G. A. Ugolnitsky, A. B. Usov, A. E. Chistyakov, M. V. Puchkin, I. S. Semenov // Mathematical Models and Computer Simulations. — 2017. — Vol. 9. — P. 101–107.

Поступила в редакцию 10.02.2023.

Поступила после рецензирования 02.03.2023.

Принята к публикации 03.03.2023.

Об авторе:

Переварюха Андрей Юрьевич, к.т.н., ст. науч. сотрудник лаборатории Прикладной информатики СПб ФИЦ РАН (РФ, 199178, г. Санкт-Петербург, ул. 14-линия, 39) [SPIN-код: 6070-5310](#), [ScopusID](#), [ORCID](#)

Автор прочитал и одобрил окончательный вариант рукописи.

УДК 519.63

Научная статья

<https://doi.org/10.23947/2587-8999-2023-6-1-53-69>**Семейство методов обратных характеристик**И. Б. Петров  , Д. И. Петров

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), Российская Федерация, Московская область, г. Долгопрудный, Институтский переулок, 9

✉ petrov@mipt.ru**Аннотация**

Введение. Основной идеей сеточно-характеристического метода является учет характеристических свойств, систем уравнений гиперболического типа, конечной скорости распространения возмущений в моделируемой среде.

Материалы и методы. Простейшим уравнением гиперболического типа является одномерное линейное уравнение переноса. Для повышения порядка аппроксимации сеточно-характеристической схемы до второго, можно использовать схему Бима-Уорминга. Если использовать четырехточечный шаблон, то получим центральную схему Лакса-Вендроффа. Разностные схемы для линейного уравнения переноса можно получать, используя метод неопределенных коэффициентов.

Результаты исследования. Сеточно-характеристическая схема допускает консервативный вариант, актуальный, если внутри области интегрирования имеются разрывы (скачки уплотнения, ударные волны) при этом исходная система уравнений для матрицы с постоянными коэффициентами, в частных производных должна быть представлена в дивергентной форме.

Обсуждение и заключения. При численном решении трехмерной задачи построение производится аналогично, в случае верхней и нижней границ, после скалярного умножения схемы на собственные векторы получены соотношения аппроксимирующие с первым порядком точности условия совместимости.

Ключевые слова: сеточно-характеристический метод, уравнения гиперболического типа, уравнение переноса, схема Бима-Уорминга, схема Лакса-Вендроффа, метод неопределенных коэффициентов, условия совместимости.

Финансирование. Работа выполнена в рамках проекта Российского научного фонда № 21-71-10015.

Для цитирования. Петров, И. Б. Семейство методов обратных характеристик / И. Б. Петров, Д. И. Петров // Computational Mathematics and Information Technologies. — 2023. — Т. 6, № 1. — С. 53–69.

<https://doi.org/10.23947/2587-8999-2023-6-1-53-69>

Original article

A family of inverse characteristics methodsI. B. Petrov  , D. I. Petrov

Moscow Institute of Physics and Technology (National Research University), 9, Institutsky Lane, Dolgoprudny, Moscow Region, Russian Federation

✉ petrov@mipt.ru**Abstract**

Introduction. The main idea of the grid-characteristic method is to take into account the characteristic properties, systems of hyperbolic equations, and the finite velocity of propagation of perturbations in the simulated media.

Materials and methods. The simplest hyperbolic equation is a one-dimensional linear transfer equation. To increase the order of approximation of the grid-characteristic scheme to the second, you can use the Bim-Warming scheme. If we use a four-point pattern, we get a central Lax-Vendroff scheme. Difference schemes for the linear transfer equation can be obtained using the method of indefinite coefficients.

Results. The grid-characteristic scheme admits a conservative variant, which is relevant if there are discontinuities (shock waves, shock waves) inside the integration domain, while the original system of equations for a matrix with constant coefficients, in partial derivatives, should be presented in a divergent form.

Discussion and conclusions. When numerically solving a three-dimensional problem, the construction is performed similarly, in the case of upper and lower bounds, after scalar multiplication of the scheme by eigenvectors, relations approximating the compatibility conditions with the first order of accuracy are obtained.

Keywords: grid-characteristic method, hyperbolic type equations, transfer equation, Beam-Warming scheme, Lax-Wendroff scheme, method of indefinite coefficients, compatibility conditions.

Funding information. The work was carried out within the framework of the Russian Science Foundation project No. 21-71-10015.

For citation. Petrov, I. B. Family of methods of inverse characteristics / I. B. Petrov, D. I. Petrov // Computational Mathematics and Information Technologies. — 2023. — Vol. 6, no. 1. — P. 53–69. <https://doi.org/10.23947/2587-8999-2023-6-1-53-69>

Введение. Основной идеей сеточно-характеристического метода является учет характеристических свойств, систем уравнений гиперболического типа, конечной скорости распространения возмущений в моделируемой среде. Обзоры соответствующих работ приведены в [1–6].

Простейшим уравнением гиперболического типа является одномерное линейное уравнение переноса:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial u}{\partial x} = 0, \quad a = \text{const}, \quad a > 0, \quad (1)$$

а простейшей разностной схемой, учитывающей характеристические свойства (1) — схема «уголок», или схема Куранта-Изаксона-Рисса:

$$u_m^{n+1} = (1 - \sigma) u_m^n + \sigma u_{m-1}^n, \quad \sigma = \frac{a\tau}{h}. \quad (2)$$

Эта схема учитывает направление характеристики данного уравнения и может быть получена путем линейной интерполяции численного решения по известным его значениям в узлах x_m, x_{m-1} расчетной сетки. Эту схему можно представить в следующих видах:

$$u_m^{n+1} = u_m^n - \sigma \begin{cases} u_{m+1}^n - u_m^n, & a < 0, \\ u_m^n - u_{m-1}^n, & a > 0, \end{cases}$$

(разность выбирается с учетом наклона характеристики):

$$u_m^{n+1} = u_m^n - \frac{\tau}{h} \left[a^+ (u_{m+1}^n - u_m^n) + a^- (u_m^n - u_{m-1}^n) \right],$$

где $a^+ = 0,5(a + |a|)$, $a^- = 0,5(a - |a|)$; $u_m^{n+1} = u_m^n - \frac{\sigma}{2} (u_{m+1}^n - u_{m-1}^n) + \frac{|\sigma|}{2} (u_{m+1}^n - 2u_m^n + u_{m-1}^n)$

(схема с явным выделением диссипативного слагаемого, обеспечивающего ее устойчивость):

$$u_m^{n+1} = u_m^n - \sigma (\Phi_{m+1/2}^n - \Phi_{m-1/2}^n),$$

где

$$\Phi_{m+1/2}^n = \frac{1}{2} [a(u_{m+1}^n - u_m^n) - |a|(u_{m+1}^n - u_m^n)],$$

$$\Phi_{m-1/2}^n = \frac{1}{2} [a(u_m^n - u_{m-1}^n) - |a|(u_m^n - u_{m-1}^n)],$$

(потокковая форма).

В случае нелинейного уравнения переноса:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial x} = 0, \quad f = \frac{u^2}{2}, \quad (3)$$

схема «уголок», учитывающая направления характеристик, может быть представлена в следующем виде:

$$u_m^{n+1} = u_m^n - \frac{\tau}{h} \begin{cases} f_{m+1}^n - f_m^n, & u_m^n < 0, \\ f_m^n - f_{m-1}^n, & u_m^n > 0. \end{cases}$$

Приведенная разностная схема имеет первый порядок аппроксимации по времени и координате. Для повышения порядка аппроксимации сеточно-характеристической схемы до второго, можно использовать схему Бима Уорминга, которая может быть получена на четырехточечном шаблоне $\{x_{m-2}^n, x_{m-1}^n, x_m^n\}$ путем квадратической интерполяции решения на n -ом временном слое по узлам $x_{m-2}^n, x_{m-1}^n, x_m^n$:

$$u_m^{n+1} = u_m^n - \sigma(u_m^n - u_{m-1}^n) - \frac{\sigma}{2}(1 - \sigma)(u_m^n - 2u_{m-1}^n + u_{m-2}^n). \quad (4)$$

Если использовать четырехточечный шаблон $\{x_m^{n+1}, x_{m-1}^n, x_m^n, x_{m+1}^n\}$, то получим центральную схему Лакса-Вендроффа:

$$u_m^{n+1} = u_m^n - \frac{\sigma}{2}(u_{m+1}^n - u_{m-1}^n) + \frac{\sigma^2}{2}(u_{m+1}^n - 2u_m^n + u_{m-1}^n). \quad (5)$$

Эта схема, как и схема Бима-Уорминга, имеет второй порядок аппроксимации по времени и пространству $O(\tau^2 + h^2)$, что проверяется разложением сеточных функций $u_{m\pm 1}^n$ в ряд Тейлора, и является устойчивой при выполнении условия Куранта $\tau \leq h/a$, что можно получить, используя спектральный признак устойчивости Неймана. При добавлении точки x_{m-2}^n к шаблону, соответствующему схеме Лакса-Вендроффа, получим схему 3-го порядка аппроксимации на четырехточечном шаблоне $\{x_m^{n+1}, x_{m-1}^n, x_m^n, x_{m+1}^n\}$:

$$u_m^{n+1} = u_m^n - \frac{\sigma}{6}(2u_{m+1}^n + 3u_m^n - 6u_{m-1}^n + u_{m-2}^n) + \frac{\sigma^2}{2}(u_{m+1}^n - 2u_m^n + u_{m-1}^n) - \frac{\sigma^3}{6}(u_{m+1}^n + 3u_{m-1}^n - 3u_m^n - u_{m-2}^n). \quad (6)$$

Для повышения порядка точности схемы добавим к последнему шаблону точку x_{m+2}^n , при этом разностная схема 4-го порядка аппроксимации будет иметь вид:

$$u_m^{n+1} = u_m^n - \frac{\sigma}{12}(8u_{m+1}^n - 8u_{m-1}^n - u_{m+2}^n + u_{m-2}^n) + \frac{\sigma^2}{24}(16u_{m+1}^n - 30u_m^n + 16u_{m-1}^n - u_{m+2}^n - u_{m-2}^n) - \frac{\sigma^3}{12}(2u_{m-1}^n - 2u_{m+1}^n + u_{m+2}^n - u_{m-2}^n) + \frac{\sigma^4}{24}(6u_m^n - 4u_{m+1}^n - 4u_{m-1}^n + u_{m+2}^n + u_{m-2}^n). \quad (7)$$

Если рассматривается линейная акустическая система уравнений вида:

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{1}{\rho} \cdot \frac{\partial p}{\partial x} = 0, \\ \frac{\partial p}{\partial t} + \rho c^2 \cdot \frac{\partial u}{\partial x} = 0, \end{cases} \quad (8)$$

где u, p — локальная скорость среды и давление, ρ — плотность, c — скорость звука, то, как отмечалось во второй главе, ее можно привести к виду:

$$\begin{cases} \frac{\partial r}{\partial t} + a \frac{\partial r}{\partial x} = 0 \\ \frac{\partial s}{\partial t} - a \frac{\partial s}{\partial x} = 0, \end{cases} \quad (9)$$

где $r = u + \frac{p}{\rho a}$, $s = u - \frac{p}{\rho a}$ — инварианты Римана.

В этом случае сеточно-характеристический метод может быть представлен в следующем виде:

$$\begin{cases} r_m^{n+1} = (1 - \sigma) \cdot r_m^n + \sigma r_{m-1}^n, \\ s_m^{n+1} = (1 - \sigma) \cdot s_m^n + \sigma s_{m+1}^n. \end{cases} \quad (10)$$

Соответствующий шаблон имеет вид:

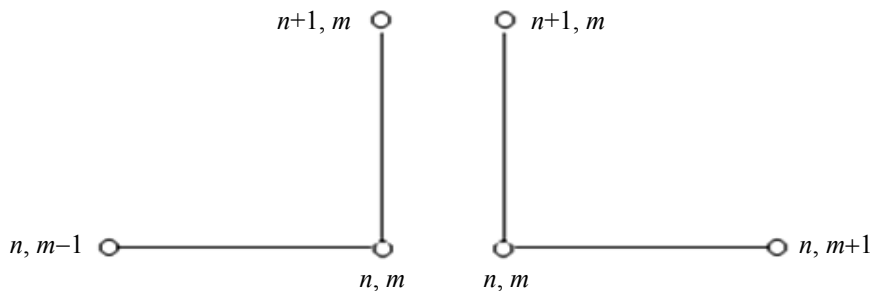


Рис. 1. Шаблон сеточно-характеристического метода для линейной акустической системы уравнений

Приведенные разностные схемы можно получить следующим образом.

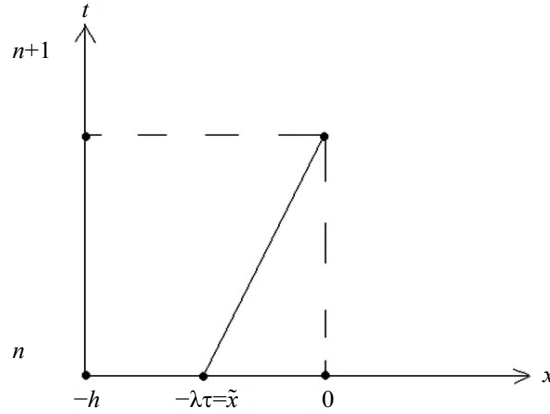


Рис. 2. Двухточечный шаблон ($x_n = 0, x_m = -h$)

На рис. 2 представлен двухточечный шаблон ($x_n = 0, x_m = -h$), на котором, в случае схемы 1-го порядка, строится полином 1-го порядка $P_1(x) = a_1x + a_0$, коэффициенты которого находятся из условий:

$$u_m^n = a_1x_m + a_0, \quad u_{m-1}^n = a_1x_{m-1} + a_0,$$

$$a_1 = (u_m^n - u_{m-1}^n) / h, \quad a_0 = u_m^n.$$

Тогда получается:

$$P(x) = \frac{u_m^n - u_{m-1}^n}{h} x + u_m^n.$$

Поскольку $u_m^{n+1} = u(\tilde{x}) = u(-\lambda\tau)$, то получается схема «левый уголок» (или КИР):

$$u_m^{n+1} = u_m^n - \sigma(u_m^n - u_{m-1}^n).$$

Если к этому шаблону добавить точку x_{m+1}^n то получается полином второго порядка: $P_2(x) = a_2x^2 + a_1x + a_0$, коэффициенты которого находятся аналогичным образом (из условий прохождения полинома $P(x)$ через значения функции в узлах шаблона):

$$a_2 = (u_{m+1}^n - 2u_m^n + u_{m-1}^n) / 2h^2,$$

$$a_1 = (u_{m+1}^n - u_{m-1}^n) / 2h,$$

$$a_0 = u_m^n.$$

В этом случае получается схема Лакса-Вендроффа. При добавлении к данному шаблону точки x_{m-2}^n , получается полином третьего порядка: $P_3(x) = a_3x^3 + a_2x^2 + a_1x + a_0$ с коэффициентами, которые находятся из тех же условий:

$$a_3 = (u_{m+1}^n + 3u_m^n - 3u_{m-1}^n - u_{m-2}^n) / 6h^3,$$

$$a_2 = (u_{m+1}^n - 2u_m^n + u_{m-1}^n) / 2h^2,$$

$$a_1 = (2u_{m+1}^n + 3u_m^n - 6u_{m-1}^n + u_{m-2}^n) / 6h,$$

$$a_0 = u_m^n.$$

В результате получается схема Русанова третьего порядка точности. Если добавить к шаблону точку x_{m+2}^n , то получается полином четвертой степени: $P_4(x) = a_4x^4 + a_3x^3 + a_2x^2 + a_1x + a_0$ с коэффициентами:

$$a_4 = (6u_{m+1}^n - 4u_{m+2}^n - 4u_{m-1}^n + u_{m-2}^n) / 24h^4,$$

$$a_3 = (2u_{m+1}^n - 2u_{m+2}^n + u_{m+3}^n + u_{m-2}^n) / 12h^3,$$

$$a_2 = (16u_{m+1}^n - 30u_m^n + 16u_{m-1}^n - u_{m+2}^n - u_{m-2}^n) / 24h^2,$$

$$a_1 = (8u_{m+1}^n - 8u_{m-1}^n - u_{m+2}^n + u_{m-2}^n) / 12h,$$

$$a_0 = u_m^n$$

и, соответственно, схему четвертого порядка аппроксимации.

Разностные схемы для линейного уравнения переноса также можно получать, используя метод неопределенных коэффициентов.

Например, на шаблоне $\{(t^n, x_{m+1}), (t^n, x_m), (t^n, x_{m-1}), (t^n, x_{m-2}), (t^n, x_{m-3})\}$ можно представить все линейные схемы с неопределенными коэффициентами $\{\alpha_j^0; j = -2, -1, 0, 1\}$ в следующем виде:

$$u_m^{n+1} = \alpha_{-2}^0 u_{m-2}^n + \alpha_{-1}^0 u_{m-1}^n + \alpha_0^0 u_m^n + \alpha_1^0 u_{m+1}^n.$$

После разложения сеточных функций в ряд Тейлора:

$$u_m^{n+1} = u_m^n + \tau(u_t')_m^n + \frac{\tau^2}{2}(u_t'')_m^n + \frac{\tau^3}{6}(u_t''')_m^n + O(\tau^4),$$

$$u_{m+1}^n = u_m^n + h(u_x')_m^n + \frac{h^2}{2}(u_{xx}'')_m^n + \frac{h^3}{6}(u_{xxx}''')_m^n + O(h^4),$$

$$u_{m-1}^n = u_m^n - h(u_x')_m^n + \frac{h^2}{2}(u_{xx}'')_m^n - \frac{h^3}{6}(u_{xxx}''')_m^n + O(h^4),$$

$$u_{m-2}^n = u_m^n - 2h(u_x')_m^n + 2h(u_{xx}'')_m^n - \frac{4h^3}{3}(u_{xxx}''')_m^n + O(h^4),$$

принимая во внимание следствия линейного уравнения переноса:

$$\begin{aligned} u_t' &= -\lambda u_x', & u_{tt}'' &= \lambda^2 u_{xx}'', & u_{ttt}''' &= -\lambda^3 u_{xxx}''', \\ u_{tx}'' &= -\lambda u_{xx}'', & u_{ttx}''' &= \lambda^2 u_{xxx}''', & u_{tttx}'''' &= -\lambda u_{xxxx}'''' \end{aligned}$$

и приравнявая коэффициенты в левой и правой частях уравнения (10), можно получить условия аппроксимации:

$$\begin{cases} \lambda_{-2}^0 + \lambda_{-1}^0 + \lambda_0^0 + \lambda_1^0 = 1, \\ 2\lambda_{-2}^0 + \lambda_{-1}^0 - \lambda_1^0 = \sigma, \end{cases} \quad (11)$$

– для схемы первого порядка:

$$\begin{cases} \lambda_{-2}^0 + \lambda_{-1}^0 + \lambda_0^0 + \lambda_1^0 = 1, \\ 2\lambda_{-2}^0 + \lambda_{-1}^0 - \lambda_1^0 = \sigma, \\ 4\lambda_{-2}^0 + \lambda_{-1}^0 + \lambda_1^0 = \sigma^2, \end{cases} \quad (12)$$

– для схемы второго порядка:

$$\begin{cases} \lambda_{-2}^0 + \lambda_{-1}^0 + \lambda_0^0 + \lambda_1^0 = 1, \\ 2\lambda_{-2}^0 + \lambda_{-1}^0 - \lambda_1^0 = \sigma, \\ 4\lambda_{-2}^0 + \lambda_{-1}^0 + \lambda_1^0 = \sigma^2, \\ 8\lambda_{-2}^0 + \lambda_{-1}^0 - \lambda_1^0 = \sigma^3, \end{cases} \quad (13)$$

– для схемы четвертого порядка точности.

Если найти все неопределенные коэффициенты из (13) и подставить их в (10), то можно найти первое дифференциальное приближение схемы:

$$u_t' + \lambda u_x' = \frac{u_{xx}''}{24} \lambda (\lambda^4 \tau^3 + 2\lambda^2 \tau h + \lambda^2 h^2 - 2h^3), \quad (14)$$

т. е. на рассмотренном шаблоне можно построить разностные схемы не выше третьего порядка аппроксимации (полагая $O(\tau^3 + h^3)$).

В случае шаблона общего вида множество разностных схем может быть представлено в следующем виде:

$$\begin{aligned} u_m^{n+1} &= \sum \lambda_j^i(\sigma) u_{m+j}^{n+i}, \\ i &= 1, 0, -1, \dots; j = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \end{aligned} \quad (15)$$

Условия аппроксимации первого порядка в этом случае можно записать в виде:

$$\sum_{i,j} \alpha_j^i = 1, \quad \sum_{i,j} (j - i\sigma) \cdot \alpha_j^i(\sigma) = -\sigma.$$

Условия аппроксимации второго и более высокого порядков будут иметь вид:

$$\sum (j-i\sigma)^p \cdot \alpha_j^i = (-\sigma)^p; p=2,3,\dots$$

Так, для четырехточечного шаблона и двухслойной явной разностной схемы:

$$\{t^{n+1}, x_m; t^n, x_{m-2}; t^n, x_{m-1}; t^n, x_m; t^n, x_{m+1}\}$$

можно представить все семейство линейных разностных схем с неопределенными коэффициентами:

$$L_j^0, (j=-2,-1,0,1)$$

в следующем виде:

$$u_m^{n+1} = L_{-2}^0 \cdot u_{m-2}^n + L_{-1}^0 \cdot u_{m-1}^n + L_0^0 \cdot u_m^n + L_1^0 \cdot u_{m+1}^n. \quad (16)$$

Условия аппроксимации первого, второго и третьего порядка на решениях задачи есть линейные относительно неопределенных коэффициентов равенства:

$$\begin{cases} \alpha_{-2}^0 + \alpha_{-1}^0 + \alpha_0^0 + \alpha_1^0 = 1, \\ 2\alpha_{-2}^0 + \alpha_{-1}^0 - \alpha_1^0 = \sigma, \\ 4\alpha_{-2}^0 + \alpha_{-1}^0 + \alpha_1^0 = \sigma^2, \\ 8\alpha_{-2}^0 + \alpha_{-1}^0 - \alpha_1^0 = \sigma^3. \end{cases}$$

Эти условия можно легко получить, если разложить все значения проекции точного решения задачи при подстановке в ряд Тейлора относительно любой точки нашего сеточного шаблона, например, (t^n, x_m) :

$$\begin{cases} u_m^{n+1} = u_m^n + \tau(u_t)_m^n + \frac{\tau^2}{2}(u_{tt})_m^n + \frac{\tau^3}{6}(u_{ttt})_m^n + O(\tau^4), \\ \alpha_1^0 u_{m+1}^n = \alpha_1^0 \left(u_m^n + h(u_x)_m^n + \frac{h^2}{2}(u_{xx})_m^n + \frac{h^3}{6}(u_{xxx})_m^n + O(h^4) \right), \\ \alpha_0^0 u_m^n = \alpha_0^0 u_m^n, \\ \alpha_{-1}^0 u_{m-1}^n = \alpha_{-1}^0 \left(u_m^n - h(u_x)_m^n + \frac{h^2}{2}(u_{xx})_m^n + \frac{h^3}{6}(u_{xxx})_m^n + O(h^4) \right), \\ \alpha_{-2}^0 u_{m-2}^n = \alpha_{-2}^0 \left(u_m^n - 2h(u_x)_m^n + 2h^2(u_{xx})_m^n - \frac{4h^3}{3}(u_{xxx})_m^n + O(h^4) \right) \end{cases}$$

Также нужно воспользоваться следствиями уравнения:

$$u_t = -\lambda u_t, u_{tt} = \lambda^2 u_{xx}, u_{tx} = -2\lambda u_{xx},$$

$$u_{ttt} = -\lambda^3 u_{xxx}, u_{ttx} = \lambda^2 u_{xxx}, u_{txx} = -\lambda u_{xxx}.$$

С использованием эти выражений можно избавиться от частных производных по времени, выражая через пространственные производные:

$$u_m^{n+1} = u_m^n - \lambda \tau (u_x)_m^n + \frac{\lambda^2 \tau^2}{2} (u_{xx})_m^n - \frac{\lambda^3 \tau^3}{6} (u_{xxx})_m^n + O(\tau^4).$$

Приравнявая значения $u_m^n, (u_x)_m^n, (u_{xx})_m^n, (u_{xxx})_m^n$, в левой и правой частях получаем условия аппроксимации.

При $\alpha_{-2}^0 = 0$ выводится разностная схема Лакса-Вендроффа, при $\alpha_{-2}^0 = \frac{\sigma}{2}(\sigma-1)$ — схема Бима-Уорминга, при $\alpha_{-2}^0 = \frac{\sigma}{6}(\sigma^2-1)$ — единственная на рассматриваемом шаблоне схема третьего порядка аппроксимации (Рунсана).

Результаты исследования.

Предлагается рассмотреть случай линейной системы уравнений переноса вида:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + A \frac{\partial u}{\partial x} = 0, \quad (17)$$

где $A(n \times m)$ — матрица с постоянными элементами и действительными собственными числами $\lambda, i=1, \dots, n$. Тогда эта матрица представляется в виде:

$$A = \Omega^{-1} \Lambda \Omega,$$

где Λ — диагональная матрица, состоящая из собственных чисел: $\Lambda = \text{diag} \{ \lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n \} = \text{diag} \{ \lambda_i \}; i=1$, которые определяются из уравнения: $\det(A - \lambda E) = 0$,

где E — единичная матрица; Ω — матрица, строками которой являются левые собственные векторы матрицы A с точностью до их длины из системы линейных однородных уравнений

$$\omega_i(A - \lambda_i E) = 0; i = 1, \dots, n.$$

В этом случае (17) записывается в виде:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \Omega^{-1} \Lambda \Omega \frac{\partial u}{\partial x} = 0,$$

затем эту систему умножим на Ω :

$$\Omega \frac{\partial u}{\partial t} + \Lambda \Omega \frac{\partial u}{\partial x} = 0. \quad (18)$$

При введении переменных Римана $w = \Omega u$ последнее уравнение представляется в виде:

$$\frac{\partial w}{\partial t} + \Lambda \frac{\partial w}{\partial x} = 0, \quad (19)$$

откуда видно, что система распадается на отдельные уравнения, точными решениями которых являются бегущие волны:

$$w_i = w_i(x - \lambda_i t); i = 1, \dots, n.$$

Функции w_i называются инвариантами Римана системы (17); λ_i являются скоростями распространения возмущений в среде. Общее решение рассматриваемой системы дифференциальных уравнений в частных производных есть сумма n бегущих волн, каждая из которых распространяется со своей характеристической скоростью λ_i :

$$U = \sum_{i=1}^n b_i^2 w_i(x - \lambda_i t).$$

Следует отметить, что если векторы b_i нормализованы, т. е. $|b_i| = 1$, то величины w_i можно интерпретировать как амплитуды соответствующих бегущих волн.

Можно представить (18) в скалярном виде:

$$\omega_i \frac{\partial u_i}{\partial t} + \lambda_i \omega_i \frac{\partial u_i}{\partial x} = 0, i = 1, \dots, n. \quad (20)$$

Далее в области интегрирования $\{t \geq 0, 0 \leq x \leq X\}$ вводится разностная сетка

$$\{t^n = n\tau; n = 0, 1, \dots; x_i = (m-1)h; m = 1, \dots, M; X = (M-1)h\}$$

и проводится аппроксимация (20) с помощью конечно-разностных соотношений с учетом наклона характеристик:

$$\frac{\partial x}{\partial t} = \lambda_i$$

(или с учетом знака λ_i):

$$\omega_i \frac{u_m^{n+1} - u_m^n}{\tau} \mp \lambda_i \omega_i \frac{u_{m\pm 1}^n - u_m^n}{h} + \omega_i f = 0, i = 1, \dots, n. \quad (21)$$

Последнее соотношение может быть представлено в матричном виде, если положить:

$$|\Lambda| = \{|\lambda_i|\}, \Lambda^+ = \frac{1}{2}(\Lambda + |\Lambda|), \Lambda^- = \frac{1}{2}(\Lambda - |\Lambda|): \quad (22)$$

$$\Omega(u_m^{n+1} - u_m^n) - \sigma \Lambda^+ \Omega(u_{m-1}^n - u_m^n) + \sigma \Lambda^- \Omega(u_{m+1}^n - u_m^n) + \tau \Omega f = 0.$$

Поскольку матрица Ω не вырождена, то полученную разностную схему можно представить в следующем виде:

$$u_m^{n+1} = u_m^n - \sigma A(u_{m+1/2}^n - u_{m-1/2}^n) - \tau f + \frac{\sigma}{2} \Omega^{-1} |\Lambda| \Omega(u_{m-1}^n - 2u_m^n + u_{m+1}^n), \quad (23)$$

$$u_{m\pm 1/2}^n = \frac{1}{2}(u_{m\pm 1}^n + u_m^n).$$

В этой схеме явно выделено слагаемое:

$$\frac{\sigma}{2} \Omega^{-1} |\Lambda| \Omega(u_{m-1}^n - 2u_m^n + u_{m+1}^n),$$

которое обеспечивает ее устойчивость при выполнении условия КФЛ (Куранта-Фридрихса-Леви):

$$\sigma \leq \frac{1}{\max |\lambda_i|}.$$

Можно сказать, что в исходную систему вводится дополнительный «диссипативный» член, обеспечивающий монотонность полученной схемы первого порядка аппроксимации, но являющийся также нефизичным источником, имеющим разностное происхождение (аппроксимационная вязкость).

Эта разностная схема, при ее обобщении на многомерный случай, принадлежит к классу положительно определенных по Фридрихсу схем, что видно из следующего ее представления:

$$u_m^{n+1} = (E - \sigma \Omega^{-1} |\Lambda| \Omega) u_m^n + \sigma \Omega^{-1} \Lambda^+ \Omega u_{m-1}^n - \sigma \Omega^{-1} \Lambda u_{m-1}^n - \tau f.$$

Рассматриваемый численный метод можно также представить в следующем виде:

$$u_m^{n+1} = u_m^n - \sigma (\Omega^{-1} \Lambda \Omega) \Delta u + \sigma^\beta (\Omega^{-1} |\Lambda|^\beta \Omega) \Delta^2 u,$$

где

$$u_m^{n+1} = u_m^n - \sigma (\Omega^{-1} \Lambda \Omega) \Delta u + \sigma^\beta (\Omega^{-1} |\Lambda|^\beta \Omega) \Delta^2 u,$$

Эта схема имеет первый порядок аппроксимации при $\beta = 1$ и второй — при $\beta = 2$.

Можно представить данную схему, как схему с весовым коэффициентом α ($0 \leq \alpha \leq 1$):

$$u_m^{n+1} = u_m^n - \sigma (\Omega^{-1} \Lambda \Omega) \Delta u + 2\sigma (\Omega^{-1} |\Lambda|^\beta \Omega) \Delta^2 u + (1 - \alpha) \sigma^2 (\Omega^{-1} \Lambda \Omega) \Delta^2 u.$$

При $\alpha = 1$ получается схема первого порядка аппроксимации, при $\alpha = 0$ — второго. При $0 < \alpha < 1$ получается схема, имеющая формально первый порядок, но, при надлежащем выборе значения α , позволяющая улучшить описание численных решений с большими градиентами за счет уменьшения аппроксимации вязкости [7].

Сеточно-характеристическая схема допускает также консервативный вариант, актуальный, если внутри области интегрирования имеются разрывы (скачки уплотнения, ударные волны). При этом исходная система уравнений для матрицы с постоянными коэффициентами в частных производных должна быть представлена в дивергентной форме:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \Lambda \frac{\partial \Phi}{\partial x} = \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial u}{\partial x} (A u) = \frac{\partial u}{\partial t} + A \frac{\partial u}{\partial x} = 0, \quad (24)$$

где $A = \frac{\partial \Phi}{\partial u}$; $\Phi = Au$; $\Phi = Au$; поскольку рассматриваемая система является гиперболической, то: $A = \Omega^{-1} \Lambda \Omega$.

В таком случае разностная схема, обладающая свойством консервативности, т. е. обеспечивающая выполнение законов сохранения, может быть представлена в следующем виде:

$$u_m^{n+1} = u_m^n - \sigma (\Phi_{m+1/2}^n - \Phi_{m-1/2}^n) + \sigma [D_{m+1/2} (u_{m+1}^n - u_m^n) / h - D_{m-1/2} (u_m^n - u_{m-1}^n) / h], \quad (25)$$

где $\Phi_{m\pm 1/2}^n = \frac{1}{2} (\Phi_{m\pm 1}^n + \Phi_m^n)$.

Понятно, что в полученной разностной схеме помимо физических потоков через границы ячеек $x_{m\pm 1/2}$ имеются также и потоки разностного происхождения

$$Du_{xx}^n, \text{ где } D = \frac{h}{2} \Omega^{-1} |\Lambda| \Omega.$$

Однако для соседних ячеек на их общей границе, они равны и противоположны по знаку. Поэтому, внутри области интегрирования схема консервативна, что проверяется их сложением по всей области.

Нужно отметить, что среди схем первого порядка аппроксимации данная схема имеет минимальную аппроксимационную вязкость. В случае трех независимых переменных $\{t, x, y\}$ консервативная и неконсервативная схемы будут иметь, соответственно, следующий вид:

$$\begin{aligned} u_{ml}^{n+1} = & u_{ml}^n - \frac{\tau}{h_1} (\Phi_{m\pm 1/2,l}^n - \Phi_{m-1/2,l}^n) - \frac{\tau}{h_2} (G_{m,l+1/2}^n - G_{m,l-1/2}^n) - \frac{\tau}{h_1} \cdot \\ & \cdot [D_{m+1/2,l}^1 (u_{m+1,l}^n - u_{ml}^n) / h_1 - D_{m-1/2,l}^1 (u_{ml}^n - u_{m-1,l}^n) / h_1] + \\ & + \frac{\tau}{h_2} [D_{m,l+1/2}^2 (u_{m,l+1}^n - u_{ml}^n) / h_2 - D_{m,l-1/2}^2 (u_{ml}^n - u_{m,l-1}^n) / h_2], \\ u_{m,l}^{n+1} = & u_{m,l}^n + \frac{\tau}{h_1} [\Omega_1^{-1} \Lambda_1^+ \Omega_1 (u_{m-1,l}^n - u_{ml}^n) - \Omega_1^{-1} \Lambda_1^- \Omega_1 (u_{m+1,l}^n - u_{ml}^n)] + \\ & + \frac{\tau}{h_2} [\Omega_2^{-1} \Lambda_2^+ \Omega_2 (u_{m,l-1}^n - u_{ml}^n) - \Omega_2^{-1} \Lambda_2^- \Omega_2 (u_{m,l+1}^n - u_{ml}^n)], \end{aligned} \quad (26)$$

где $D^k = \frac{h_k}{2} \Omega_k^{-1} |\Lambda_k| \Omega_k$; $k = 1, 2$;

матрицы Λ_k , $\Lambda_k^\pm$, Ω_k , как и в одномерном случае, состоят из собственных значений и собственных векторов матриц A_k ; в области интегрирования $\{t \geq 0; x \leq x \leq X, 0 \leq y \leq Y\}$ введена разностная сетка

$$\{t^n = n\tau, n = 0, 1, \dots; x_n = (m-1)h_1; m = 1, \dots, M; y_l = (l-1)h_2; l = 1, \dots, L; X = (M-1)h_1, Y = (L-1)h_2\}.$$

Аналогично строятся и разностные схемы для трех переменных.

Следует вернуться к соотношению (18), которое можно представить в скалярном виде:

$$\omega_i \frac{\partial u}{\partial t} + \lambda_i \omega_i \frac{\partial u}{\partial x} = \omega_i \left(\frac{\partial u}{\partial t} + \lambda_i \frac{\partial u}{\partial x} \right) = 0, i = 1, \dots, n, \quad (27)$$

где каждая компонента вектора:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \lambda_i \frac{\partial u}{\partial x} \quad (28)$$

является уравнением переноса для соответствующей компоненты вектора u :

$$\frac{\partial u_j}{\partial t} + \lambda_i \frac{\partial u_j}{\partial x} = 0; j = 1, \dots, n.$$

Причем для каждого из этих уравнений можно построить уже известную схему:

$$u_{j,m}^{n+1} = \sum_{\mu, \nu} \alpha_\mu^\gamma(\tau, h, \lambda_i) u_{j,m+\mu}^{n+\gamma} = \sum_{\mu, \nu} \alpha_\mu^\gamma(\sigma_i) u_{j,m+\mu}^{n+\gamma}. \quad (29)$$

Далее нужно заменить вектор (28) его разностной аппроксимацией:

$$\omega_i \left(\frac{\partial u}{\partial t} + \lambda_i \frac{\partial u}{\partial x} \right) = \left[\omega_i u_m^{n+1} - \sum_{\mu, \nu} \alpha_\mu^\nu(\sigma_i) \omega_i u_{m+\mu}^{n+\gamma} \right], i = 1, \dots, n, \quad (30)$$

при этом очевидно, что каждое уравнение в (30) есть i -ая компонента вектора:

$$\Omega \frac{\partial u}{\partial t} + \Lambda \Omega \frac{\partial u}{\partial x} = 0; \quad (31)$$

т. е.

$$\Omega \frac{\partial u}{\partial t} + \Lambda \Omega \frac{\partial u}{\partial x} = \begin{cases} \omega_i u_m^{n+1} - \sum_{\mu, \nu} \alpha_\mu^\nu(\sigma_i) \omega_i u_{m+\mu}^{n+\gamma} \\ \omega_n u_m^{n+1} - \sum_{\mu} \alpha_\mu^\gamma(\sigma_n) \omega_n u_{m+\mu}^{n+\gamma} \end{cases}.$$

При умножении полученного соотношения на матрицу Ω^{-1} , получается общий вид разностной схемы для численного решения системы уравнений гиперболического типа (17):

$$u_m^{n+1} = \sum_{\mu, \gamma} \Omega^{-1} B_\mu^\gamma \Omega u_{m+\mu}^{n+\gamma}, \quad (32)$$

где $B_\mu^\gamma = \text{diag}\{\alpha_\mu^\gamma(\sigma_i)\}$ — диагональная матрица с компонентами, являющимися коэффициентами α_μ^γ , определяющими конкретный вид схемы.

Например, в случае рассмотрения разностной сеточно-характеристической схемы, получится (22), (23), (24):

$$\text{или, в другом виде, } u_m^{n+1} = (\Omega^{-1} E \Omega) u_m^n + \frac{\sigma}{2} (\Omega^{-1} \Lambda^+ \Omega) (u_{m-1}^n - u_m^n) - \sigma (\Omega^{-1} \Lambda^- \Omega) (u_{m+1}^n - u_m^n); \quad (33)$$

для полученной ранее для скалярного уравнения схемы Лакса-Вендроффа (5):

$$u_m^{n+1} = u_m^n + \frac{\sigma}{2} (\Phi_{m-1}^n - \Phi_{m+1}^n) + \frac{\sigma^2}{2} (\Omega^{-1} |\Lambda| \Omega) (u_{m-1}^n - 2u_m^n + u_{m+1}^n). \quad (34)$$

Сеточно-характеристические параметрические схемы более высоких порядков аппроксимации могут быть представлены в следующем виде:

$$u_m^{n+1} = u_m^n + \frac{\sigma}{2} (\Phi_{m-1}^n - \Phi_{m+1}^n) + \frac{\sigma^2}{2} (\Omega^{-1} \Lambda^2 \Omega) (u_{m-1}^n - 2u_m^n + u_{m+1}^n) + \\ + \frac{\sigma}{2} (\Omega^{-1} G \Lambda \Omega) (u_{m-2}^n - 2u_{m-1}^n + u_m^n - u_{m+1}^n + u_{m+2}^n) + \frac{\sigma}{2} (\Omega^{-1} G |\Lambda| \Omega) (u_{m-2}^n - 4u_{m-1}^n + 6u_m^n - 4u_{m+1}^n + u_{m+2}^n), \quad (35)$$

где $G = \text{diag}\{g_i(\sigma_i)\}$, $i = 1, \dots, n$ — диагональная параметрическая матрица.

Данная схема также может быть представлена как схема «предиктор-корректор»:

$$\begin{aligned}\tilde{u}_m^n &= u_m^n + \frac{\sigma}{2}(\Phi_{m-1}^n - \Phi_{m+1}^n) + \frac{\sigma}{2}(\Omega^{-1}|\Lambda|\Omega)(u_{m-1}^n - 2u_m^n + u_{m+1}^n), \\ u_m^{n+1} &= u_m^n + \Omega^{-1}\left(\frac{\sigma^2}{2}\Lambda^2 - \frac{\sigma}{2}|\Lambda|\right)\Omega(u_{m-1}^n - 2u_m^n + u_{m+1}^n) + \\ &+ \Omega^{-1}G\Omega\left[(\tilde{u}_m^n - 2\tilde{u}_m^n + \tilde{u}_{m-1}^n) - (u_{m-1}^n - 2u_m^n + u_{m+1}^n)\right].\end{aligned}$$

Так, при

$$g_i = \frac{\sigma_i^2 - 1}{6}$$

получается схема 3-го порядка точности (аналог схемы Рунгута).

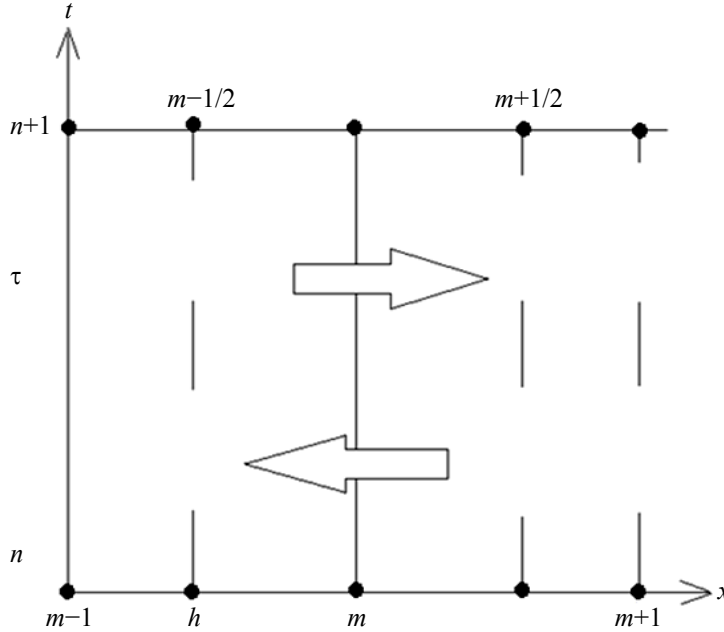


Рис. 2. Схема предиктор-корректор

Сеточно-характеристический метод может быть представлен также как метод потоков, или как интегро-интерполяционный метод, если уравнение (23) будет записано в интегральной форме:

$$\iint_s \left(\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial \Phi}{\partial x} \right) dt \cdot dx = \oint_{\Gamma} (u dx - \Phi dt) = 0, \quad (36)$$

и далее будет аппроксимироваться последний интеграл:

$$\int_{x-1/2}^{x+1/2} u^{n+1} dx + \int_{t_n}^{t_{n+1}} \Phi_{m+1/2}^{n+1/2} dt - \int_{x_{m-1/2}}^{x_{m+1/2}} u^n dx - \int_{t_n}^{t_{n+1}} \Phi_{m-1/2}^{n+1/2} dt = 0.$$

Из последнего равенства следует, если проведется аппроксимация интегралов методом средних, получится:

$$u_m^{n+1}h - \Phi_{m+1/2}^{n+1/2} - u_m^n h - \Phi_{m-1/2}^{n+1/2}\tau = 0 \quad (37)$$

(интегро-интерполяционный метод),

или же:

$$u_m^{n+1} = u_m^n - \sigma \left(\Phi_{m+1/2}^{n+1/2} - \Phi_{m-1/2}^{n+1/2} \right) \quad (38)$$

(метод потоков).

Стоит отметить, что в зарубежной литературе эти методы получили название методов конечных объемов. Понятно, что (38) представляет собой семейство численных методов, свойства которых зависят от способа вычисления потоков $\Phi_{m\pm 1/2}^{n+1/2}$; например, линейного уравнения переноса (1) потоки могут быть вычислены следующим образом, но с полуцелым верхним индексом

$$\begin{aligned}\Phi_{m+1/2}^{n+1/2} &= \frac{1}{2} \left\{ \frac{1}{2} [a(u_{m+1/2}^n - u_m^n) - |a|(u_{m+1}^n - u_m^n)] + \frac{1}{2} [a(u_{m+1/2}^{n+1} - u_m^{n+1}) - |a|(u_{m+1}^{n+1} - u_m^{n+1})] \right\}, \\ \Phi_{m-1/2}^{n+1/2} &= \frac{1}{2} \left\{ \frac{1}{2} [a(u_m^n - u_{m-1}^n) - |a|(u_m^n - u_{m-1}^n)] + \frac{1}{2} [a(u_m^{n+1} - u_{m-1}^{n+1}) - |a|(u_m^{n+1} - u_{m-1}^{n+1})] \right\}.\end{aligned} \quad (39)$$

Аналогично в потоковой форме могут быть представлены методы (33), (34) и др.

В двумерном случае сеточно-характеристический метод первого порядка аппроксимации может быть представлен в следующем виде [2]:

$$u_{ml}^{n+1} = u_{ml}^n + b_{1ml}^n + b_{2ml}^n + \tau f_{ml}^n, \quad (40)$$

где

$$\begin{aligned} b_{1ml}^n &= \sigma_1 \left[\left(\Omega_1^{-1} \Lambda_1^+ \Omega_1 \right)_{ml}^n (u_{m-1,l} - u_{ml})^n - \left(\Omega_1^{-1} \Lambda_1^- \Omega_1 \right)_{ml}^n (u_{m+1,l} - u_{ml})^n \right], \\ b_{2ml}^n &= \sigma_2 \left[\left(\Omega_2^{-1} \Lambda_2^+ \Omega_2 \right)_{ml}^n (u_{m-1,l} - u_{ml})^n - \left(\Omega_2^{-1} \Lambda_2^- \Omega_2 \right)_{ml}^n (u_{m+1,l} - u_{ml})^n \right]; \\ \Lambda_k^+ &= \frac{1}{2} (\Lambda_k + |\Lambda_k|), \quad \Lambda_k^- = \frac{1}{2} (\Lambda_k - |\Lambda_k|), \quad |\Lambda_k| = \{ |\lambda_i^k| \}, \quad \Lambda_k = \{ \lambda_i^k \}, \end{aligned}$$

$i = 1, \dots, N$ — диагональные матрицы; λ_i^k — их собственные числа; $\Omega_k = \{ \omega_{ij}^k \}$ — неособенные матрицы, строками которых являются линейно-независимые собственные левые векторы ω_i^k матриц A_k .

Для матриц $A_k = \{ a_{ij}^k \}$, в случае системы уравнений механики деформируемого твердого тела: $\lambda_i^k = \tilde{v}_i^k + y_i^k$, $i = 1, \dots, 7$, $k = 1, 2$.

Используя обычные кинематические соотношения для компонент симметричного тензора скоростей деформаций [8] в фиксированной в пространстве криволинейной ортогональной системе координат x_1 и x_2, x_3 :

$$e_{mn} = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{H_n} \frac{\partial v_m}{\partial x_n} + \frac{1}{H_m} \frac{\partial v_n}{\partial x_m} \right) + \frac{1}{H_n} \left[\delta_{mn} \left(\sum_{s=1}^3 \frac{v_s}{H_s} \frac{\partial H_m}{\partial x_s} \right) - \frac{1}{2H_n} \left(v_m \frac{\partial H_m}{\partial x_n} + \frac{\partial H_m}{\partial x_m} \right) \right],$$

$m, n = 1, 2, 3$.

Выбирая определяющие соотношения в виде:

$$\frac{d\sigma_{ij}}{dt} = \frac{d\sigma_{ij}}{dt} + \frac{v_1}{H_1} \frac{d\sigma_{ij}}{dx_1} + \frac{v_2}{H_2} \frac{d\sigma_{ij}}{dx_2} + \frac{v_3}{H_3} \frac{d\sigma_{ij}}{dx_3} = \sum_{m,n=1}^3 q_{ijmn} e_{mn}, \quad i, j = 1, 2, 3,$$

нужно записать замкнутую систему двумерных нестационарных уравнений в виде:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + A_1 \frac{\partial u}{\partial x_1} + A_2 \frac{\partial u}{\partial x_2} = f.$$

Строго говоря, вместо субстанциональной производной $d\sigma_{ij}/dt$ следует использовать, так называемую, производную Яуманна для компонент девiatora тензора напряжений типа:

$$\begin{aligned} \frac{\tilde{d}S}{dt} &= \frac{dS}{dt} - \sum_{k=1}^3 (S_{ik} \omega_{jk} + S_{jk} \omega_{ik}), \\ \omega_{ij} &= \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} - \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right), \quad S_{ij} = \sigma_{ij} - \delta_{ij} \frac{1}{3} \sum_{k=1}^3 \sigma_{kk}, \end{aligned}$$

что обеспечивает нулевую скорость изменения напряженного состояния частицы при ее вращении как жесткого целого.

Здесь символ $u = \{v_1, v_2, \sigma_{11}, \sigma_{22}, \sigma_{33}, T\}$ — вектор искоемых переменных, включающий компоненты v_1, v_2 вектора скорости V (по осям — x_1, x_2 соответственно), отличные от нуля компоненты σ_{ij} симметричного тензора напряжений и температуру T ; $f(t, x_1, x_2, u) = \{f_1, f_2, f_{11}, f_{12}, f_{22}, f_{33}, f_T\}$ — вектор правых частей со следующими компонентами в криволинейной ортогональной системе координат x_1, x_2, x_3 :

$$\begin{aligned} f_1 &= F_1 + \frac{1}{\rho} \left[\frac{(\sigma_{11} - \sigma_{22})}{H_1 H_2} + \frac{\partial H_2}{\partial x_1} + \frac{(\sigma_{11} - \sigma_{33})}{H_1 H_3} + \frac{\partial H_{12}}{\partial x_2} \left(\frac{2}{H_1} \frac{\partial H_1}{\partial x_2} + \frac{1}{H_3} \frac{\partial H_3}{\partial x_2} \right) \right] - \frac{v_2}{H_1 H_2} \left(v_1 \frac{\partial H_1}{\partial x_2} + v_2 \frac{\partial H_2}{\partial x_1} \right), \\ f_2 &= F_2 + \frac{1}{\rho} \left[\frac{(\sigma_{22} - \sigma_{33})}{H_2 H_3} + \frac{\partial H_3}{\partial x_2} + \frac{(\sigma_{22} - \sigma_{11})}{H_2 H_1} + \frac{\partial H_{12}}{\partial x_1} \left(\frac{2}{H_2} \frac{\partial H_2}{\partial x_1} + \frac{1}{H_3} \frac{\partial H_3}{\partial x_1} \right) \right] - \frac{v_1}{H_2 H_1} \left(v_2 \frac{\partial H_2}{\partial x_1} + v_1 \frac{\partial H_1}{\partial x_2} \right), \\ f_{ij} &= \frac{q_{ij11} v_2}{H_1 H_2} \frac{\partial H_2}{\partial x_2} - \frac{(q_{ij12} - q_{ij21})}{2 H_1 H_2} \left(v_1 \frac{\partial H_1}{\partial x_2} + v_2 \frac{\partial H_2}{\partial x_1} \right) + \frac{q_{ij22} v_2}{H_1 H_2} \frac{\partial H_2}{\partial x_1} + \frac{q_{ij33}}{H_3} \left(\frac{v_1}{H_1} \frac{\partial H_3}{\partial x_1} + \frac{v_2}{H_2} \frac{\partial H_3}{\partial x_2} \right) - \frac{\sigma_{ij} \gamma Q}{\rho c}, \\ f_T &= \frac{1}{\rho c} \left[\frac{\sigma_{11} v_2}{H_1 H_2} \frac{\partial H_1}{\partial x_2} - \frac{\sigma_{22}}{H_1 H_2} + \left(v_1 \frac{\partial H_1}{\partial x_2} + v_2 \frac{\partial H_2}{\partial x_1} \right) + \frac{\sigma_{ij22} v_2}{H_1 H_2} \frac{\partial H_2}{\partial x_1} + \frac{\sigma_{33}}{H_3} \left(\frac{v_1}{H_1} \frac{\partial H_3}{\partial x_1} + \frac{v_2}{H_2} \frac{\partial H_3}{\partial x_2} \right) + Q \right]. \end{aligned}$$

Здесь F_1, F_2 — компоненты вектора массовых сил, с T — внутренняя энергия для термоупругой среды, c — удельная теплоемкость материала, T — температура, Q — объемная плотность источников тепла, $H_i, i=1, 2, 3$ — коэффициенты Ляме, характеризующие выбираемую ортогональную криволинейную систему координат, ρ — плотность, определяемая уравнением состояния твердого тела, например:

$$\ln \frac{\rho}{\rho_0} = -(3K)^{-1} \sum_{i=1}^3 \sigma_{ii} - 3\alpha T,$$

ρ_0 — плотность материала в недеформируемом состоянии, K — коэффициент объемного сжатия.

В соответствии с предполагаемой здесь двумерностью деформируемого состояния, перемещения материальных точек в направлении x_3 отсутствуют и $\sigma_{13} = \sigma_{23} = v_3 = 0, \partial / \partial x_3 = 0$. Матрицы $A_k = \{a_{ij}^k\}, k=1, 2, i=1, \dots, 7$ при этом имеют вид:

$$A_1 = \frac{1}{H_1} \begin{vmatrix} v_1 & 0 & -1/\rho & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & v_1 & 0 & -1/\rho & 0 & 0 & 0 \\ -q_{111} & -(q_{112} + q_{121})/2 & v_1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ q_{121} & -(q_{122} + q_{221})/2 & 0 & v_1 & 0 & 0 & 0 \\ q_{221} & -(q_{221} + q_{222})/2 & 0 & 0 & v_1 & 0 & 0 \\ q_{331} & -(q_{332} + q_{332})/2 & 0 & 0 & 0 & v_1 & 0 \\ -\sigma_{11}/\rho_1 & -\sigma_{11}/\rho_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & v_1 \end{vmatrix},$$

$$A_2 = \frac{1}{H_2} \begin{vmatrix} v_2 & 0 & -1/\rho & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & v_2 & 0 & -1/\rho & 0 & 0 & 0 \\ -(q_{112} + q_{121})/2 & -q_{111} & v_2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -(q_{122} + q_{221})/2 & -q_{121} & 0 & v_2 & 0 & 0 & 0 \\ -(q_{221} + q_{222})/2 & -q_{221} & 0 & 0 & v_2 & 0 & 0 \\ q_{331} & -(q_{332} + q_{332})/2 & 0 & 0 & 0 & v_2 & 0 \\ -\sigma_{12}/\rho_2 & -\sigma_{22}/\rho_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & v_2 \end{vmatrix}.$$

Для принятой в настоящей работе модели Прандтля — Рейсса компоненты тензора четвертого ранга q_{ijkl} упругопластического материала имеют вид [8]:

$$q_{ijkl} = \lambda \delta_{ij} \delta_{kl} - \frac{\gamma \sigma_{ij} \delta_{ij}}{\rho c} + \mu (\delta_{ik} \delta_{jl} - \delta_{jk} \delta_{il}) - \frac{I \mu \mu_{ij} S_{kl}}{k},$$

где λ, μ — параметры Ляме, k — предел текучести на сдвиг, δ_{mn} — символы Кронекера, девиатор тензора напряжений

$$S_{mn} = \sigma_{mn} - \delta_{mn} \frac{1}{3} \sum_{s=1}^3 \sigma_{ss},$$

$\gamma = (3\lambda + 2\mu) \alpha$ (α — коэффициент линейного расширения материала при нагреве).

I определяется из условия пластичности Мизеса

$$I = \begin{cases} 0 & \text{при } S = S_{11}^2 + S_{22}^2 + S_{33}^2 + S_{12}^2 < 2k^2, \\ 1 & \text{при } S \geq 2k^2. \end{cases}$$

Определяющие соотношения при $I = 0$ являются обычным «законом Гука» для упругих изотропных материалов. При $y = 0, Q = 0$ в первые 6 уравнений не входит температура и их можно решать независимо от уравнения энергии:

$$y_1^k = -y_7^k = \left[a_k + (a_k^2 - 4d_k)^{1/2} \right]^{1/2}, \quad y_2^k = -y_6^k = \left[a_k - (a_k^2 - 4d_k)^{1/2} \right]^{1/2}, \quad y_3^k = -y_4^k = y_5^k = 0.$$

$$a_k = a_{13}^k a_{31}^k + a_{14}^k a_{41}^k + a_{24}^k a_{42}^k + a_{25}^k a_{52}^k,$$

$$d_k = a_{13}^k a_{24}^k \left((a_{31}^k a_{42}^k - a_{32}^k a_{41}^k) \right) + a_{14}^k a_{25}^k \left((a_{41}^k a_{32}^k - a_{42}^k a_{31}^k) \right) + a_{13}^k a_{25}^k \left((a_{31}^k a_{32}^k - a_{32}^k a_{31}^k) \right),$$

$k = 1, 2,$

$$\Omega_1 = \begin{pmatrix} \omega_1^1 \\ \omega_2^1 \\ \omega_3^1 \\ \omega_4^1 \\ \omega_5^1 \\ \omega_6^1 \\ \omega_7^1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & \omega_{12}^1 & \omega_{13}^1 & \omega_{14}^1 & \omega_{15}^1 & 0 & 0 \\ \omega_{21}^1 & 1 & \omega_{23}^1 & \omega_{24}^1 & \omega_{25}^1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \omega_{32}^1 & \omega_{34}^1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \omega_{43}^1 & \omega_{44}^1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \omega_{53}^1 & \omega_{54}^1 & 0 & 0 & 1 \\ \omega_{61}^1 & 1 & -\omega_{23}^1 & -\omega_{24}^1 & -\omega_{25}^1 & 0 & 0 \\ 1 & \omega_{12}^1 & -\omega_{13}^1 & -\omega_{14}^1 & -\omega_{15}^1 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$\Omega_2 = \begin{pmatrix} \omega_{11}^2 & 1 & \omega_{13}^2 & \omega_{14}^2 & \omega_{15}^2 & 0 & 0 \\ 1 & \omega_{22}^2 & \omega_{23}^2 & \omega_{24}^2 & \omega_{25}^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \omega_{34}^2 & \omega_{35}^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \omega_{44}^2 & \omega_{45}^2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \omega_{54}^2 & \omega_{55}^2 & 0 & 1 \\ 1 & \omega_{22}^2 & -\omega_{23}^2 & -\omega_{24}^2 & -\omega_{25}^2 & 0 & 0 \\ \omega_{11}^2 & 1 & -\omega_{13}^2 & -\omega_{14}^2 & -\omega_{15}^2 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Здесь:

$$\omega_{12}^1 = \frac{(y_1^1 - \alpha_1^1)}{\alpha_2^1}, \quad \omega_{21}^1 = \frac{\alpha_2^1}{(y_2^1)^2 - \alpha_1^1},$$

$$\omega_{11}^1 = \frac{\alpha_2^2}{(y_1^2)^2 - \alpha_1^2}, \quad \omega_{12}^1 = \frac{(y_2^2) - \alpha_1^2}{\alpha_2^2},$$

$$\alpha_i^k = a_{13}^k a_{31}^k + a_{14}^k a_{41}^k, \quad \alpha_2^k = a_{24}^k a_{41}^k + a_{25}^k a_{51}^k, k = 1, 2,$$

$$\omega_{i3}^1 = \frac{a_{13}^k \omega_{i1}^k}{y_i^k}, \quad \omega_{i4}^1 = \frac{a_{14}^k \omega_{i1}^k + a_{24}^k \omega_{i2}^k}{y_i^k},$$

$$\omega_{i5}^1 = \frac{a_{25}^k \omega_{i2}^k}{y_i^k}, i = 1, 2,$$

$$\omega_{i3}^k = \frac{a_{42}^k \beta_{i1}^1 - a_{41}^k \beta_{i2}^1}{a_{32}^k \beta_{i2}^1 - a_{41}^k \beta_{i2}^1}, \quad \omega_{i4}^k = \frac{a_{32}^k \beta_{i1}^1 - a_{31}^k \beta_{i2}^1}{a_{31}^k \beta_{42}^1 - a_{32}^k \beta_{41}^1},$$

$$\omega_{i4}^2 = \frac{a_{52}^2 \beta_{i1}^2 - a_{51}^2 \beta_{i2}^2}{a_{51}^2 \beta_{i2}^2 - a_{52}^2 \beta_{41}^2}, \quad \omega_{i5}^k = \frac{a_{42}^2 \beta_{i1}^2 - a_{41}^2 \beta_{i2}^2}{a_{52}^2 \beta_{i1}^2 - a_{51}^2 \beta_{42}^2},$$

$$\beta_{ij}^1 = a_{5j}^1 \omega_{i5}^1 + a_{6j}^1 \omega_{i6}^1 + a_{7j}^1 \omega_{i7}^1,$$

$$\beta_{ij}^2 = a_{3j}^2 \omega_{i3}^2 + a_{6j}^2 \omega_{i6}^2 + a_{7j}^2 \omega_{i7}^2, \quad j = 1, 2, \quad i = 3, 4, 5,$$

$$\Omega_k^{-1} = \{p_{ij}^k\}.$$

В этом случае для обратных матриц:

$$\Omega_k^{-1} = \begin{pmatrix} p_{11}^k & p_{12}^k & 0 & 0 & 0 & p_{12}^k & p_{11}^k \\ p_{21}^k & p_{22}^k & 0 & 0 & 0 & p_{22}^k & p_{21}^k \\ p_{31}^k & p_{32}^k & p_{33}^k & 0 & 0 & -p_{32}^k & -p_{31}^k \\ p_{41}^k & p_{42}^k & p_{43}^k & 0 & 0 & -p_{42}^k & -p_{41}^k \\ p_{51}^k & p_{52}^k & p_{53}^k & 0 & 0 & -p_{52}^k & -p_{51}^k \\ p_{61}^k & p_{62}^k & p_{63}^k & 1 & 0 & -p_{62}^k & -p_{61}^k \\ p_{71}^k & p_{72}^k & p_{73}^k & 0 & 1 & -p_{72}^k & -p_{71}^k \end{pmatrix},$$

где:

$$p_{11}^1 = p_{22}^1 = \frac{(\Delta_2^1)}{2}, \quad p_{12}^1 = -\frac{\omega_{12}^1}{2\Delta_2^1}, \quad p_{21}^1 = -\frac{\omega_{21}^1}{2\Delta_2^1}, \quad \Delta_2^1 = 1 - \omega_{12}^1 \omega_{21}^1.$$

$$p_{31}^1 = \frac{\omega_{25}^1 \omega_{34}^1 - \omega_{14}^1 \omega_{25}^1}{2\Delta_1^1}, \quad p_{32}^1 = \frac{\omega_{14}^1 - \omega_{15}^1 \omega_{34}^1}{2\Delta_1^1},$$

$$p_{33}^1 = \frac{\omega_{15}^1 \omega_{24}^1 - \omega_{14}^1 \omega_{25}^1}{2\Delta_1^1}, \quad p_{41}^1 = \frac{\omega_{23}^1 - \omega_{25}^1 \omega_{33}^1}{2\Delta_1^1},$$

$$\begin{aligned}
 p_{42}^1 &= \frac{\omega_{15}^1 \omega_{33}^1 - \omega_{13}^1}{2\Delta_1^1}, & p_{43}^1 &= \frac{\omega_{25}^1 \omega_{13}^1 - \omega_{15}^1 \omega_{23}^1}{\Delta_1^1}, \\
 p_{51}^1 &= \frac{\omega_{24}^1 \omega_{33}^1 - \omega_{23}^1 \omega_{34}^1}{2\Delta_1^1}, & p_{52}^1 &= \frac{\omega_{13}^1 \omega_{24}^1 - \omega_{14}^1 \omega_{33}^1}{2\Delta_1^1}, \\
 p_{53}^1 &= \frac{\omega_{14}^1 \omega_{23}^1 - \omega_{13}^1 \omega_{24}^1}{\Delta_1^1}, \\
 p_{i1}^1 &= \left[\omega_{i-2,3}^1 (\omega_{24}^1 - \omega_{25}^1 \omega_{34}^1) - \omega_{i-2,4}^1 (\omega_{23}^1 - \omega_{25}^1 \omega_{33}^1) \right] (2\Delta_1^1)^{-1}, \\
 p_{i2}^1 &= \left[\omega_{i-2,4}^1 (\omega_{13}^1 - \omega_{15}^1 \omega_{33}^1) - \omega_{i-2,3}^1 (\omega_{14}^1 - \omega_{15}^1 \omega_{34}^1) \right] (2\Delta_1^1)^{-1}, \\
 p_{i3}^1 &= \left[\omega_{i-2,3}^1 (\omega_{14}^1 \omega_{25}^1 - \omega_{15}^1 \omega_{24}^1) - \omega_{i-2,4}^1 (\omega_{13}^1 \omega_{25}^1 - \omega_{15}^1 \omega_{23}^1) \right] (\Delta_1^1)^{-1}, \\
 \Delta_1^1 &= \omega_{15}^1 (\omega_{24}^1 \omega_{33}^1 - \omega_{23}^1 \omega_{34}^1) + \omega_{25}^1 (\omega_{13}^1 \omega_{34}^1 - \omega_{14}^1 \omega_{33}^1) + (\omega_{14}^1 \omega_{23}^1 - \omega_{13}^1 \omega_{24}^1).
 \end{aligned}$$

И, аналогично:

$$\begin{aligned}
 p_{43}^2 &= \frac{\omega_{23}^2 \omega_{23}^2 - \omega_{13}^2 \omega_{25}^2}{\Delta_1^2}, & p_{54}^1 &= \frac{\omega_{23}^2 \omega_{34}^2 - \omega_{24}^2}{2\Delta_1^2}, \\
 p_{52}^2 &= \frac{\omega_{14}^2 - \omega_{13}^2 \omega_{34}^2}{2\Delta_1^2}, & p_{53}^1 &= \frac{\omega_{13}^2 \omega_{24}^2 - \omega_{23}^2 \omega_{14}^2}{\Delta_1^2}, \\
 p_{i1}^2 &= \left[\omega_{i-2,3}^2 (\omega_{24}^2 - \omega_{25}^2 \omega_{34}^2) - \omega_{i-2,4}^2 (\omega_{25}^2 - \omega_{23}^2 \omega_{35}^2) \right] (2\Delta_1^2)^{-1}, \\
 p_{i2}^2 &= \left[\omega_{i-2,4}^2 (\omega_{15}^2 - \omega_{13}^2 \omega_{35}^2) - \omega_{i-2,5}^2 (\omega_{14}^2 - \omega_{13}^2 \omega_{34}^2) \right] (2\Delta_1^2)^{-1}, \\
 p_{i3}^1 &= \left[\omega_{i-2,4}^2 (\omega_{13}^2 \omega_{25}^2 - \omega_{15}^2 \omega_{23}^2) - \omega_{i-2,5}^2 (\omega_{14}^2 \omega_{23}^2 - \omega_{13}^2 \omega_{24}^2) \right] (\Delta_1^2)^{-1}, \\
 & i = 6, 7, \\
 \Delta_1^2 &= \omega_{13}^2 (\omega_{24}^2 \omega_{35}^2 - \omega_{25}^2 \omega_{34}^2) + \omega_{23}^2 (\omega_{15}^2 \omega_{34}^2 - \omega_{14}^2 \omega_{35}^2) + (\omega_{14}^2 \omega_{25}^2 - \omega_{15}^2 \omega_{24}^2).
 \end{aligned}$$

При построении расчетных формул на границах прямоугольной (в координатах t, x_1, x_2) области интегрирования ограничимся рассмотрением только верхней ($x_2 = 0$) и нижней ($x_2 = 1$) границ, имея в виду, что остальные границы ($x_1 = 0, x_{1*}$) часто являются плоскостью (или осью) симметрии или периодичности решения либо выбираются таким образом, чтобы за рассматриваемое время $t \leq t_1$ возмущения не достигали этих границ. Обобщение на случай более сложных условий на границах не представляет принципиальных трудностей и аналогично рассматриваемому ниже.

При умножении скалярно на собственные векторы $(\omega^2)_{ml}^n$ получатся соотношения:

$$\begin{aligned}
 (\omega_i^2)_{ml}^n u_{ml}^{n+1} &= B_i^2 = (\omega_i^2)_{ml}^n (u_{ml}^n + \tau f_{ml}^n) \pm \\
 &\pm \frac{\tau}{h_2} (\lambda_i^2)_{ml}^n (\omega_i^2)_{ml}^n (u_{m,l \mp 1}^n + u_{ml}^n), i = 1, \dots, 7,
 \end{aligned}$$

аппроксимирующие с первым порядком точности условия совместности вдоль линий пересечения характеристических поверхностей системы и координатной плоскости $x_1 = x_{1m}$ (с уравнениями $dx_2 = \lambda^2_i dt$):

$$\omega_i^2 u_i + \lambda_i^2 \omega_{x_2}^2 u_{x_2} = \omega_i^2 (f - A_1 u_{x_2}), i = 1, \dots, 7.$$

Как известно, число граничных условий для гиперболической системы уравнений типа определяется числом отрицательных (положительных) собственных значений матрицы Au на верхней (соответственно, нижней) границе области интегрирования. В рассматриваемых ниже задачах на верхней границе $x_1 = 0$ имеет место $\lambda_7^2 < \lambda_6^2 < 0$, на нижней границе $x_2 = 0$ — соответственно, $\lambda_7^2 > \lambda_1^2 > 0$ и; следовательно, на каждой из этих границ требуется постановка двух граничных условий, которые записываются в виде:

$$\begin{aligned}
 \Phi_i(t, x_1, u_1, \dots, u_7) &= 0, i = 1, 2 \text{ при } x_2 = 0, \\
 \Phi_i(t, x_1, u_1, \dots, u_7) &= 0, i = 1, 6, 7 \text{ при } x_2 = 1,
 \end{aligned}$$

причем необходимо, чтобы $\det \Omega_- \neq 0, \det \Omega_+ \neq 0$,

где, соответственно, $\Omega_- = \|\bar{\omega}_1 \bar{\omega}_2 \bar{\omega}_3 \dots \bar{\omega}_7\|^T$, $\Omega_+ = \|\omega_1 \dots \omega_5 \bar{\omega}_6 \bar{\omega}_7\|^T$.

Здесь $\bar{\omega}_i = \{\partial \phi_i / \partial u_1, \dots, \partial \phi_i / \partial u_7\}$, $i = 1, 2, 6, 7$, а $i = 1, \dots, 7$ — собственные векторы матрицы A_2 . Для рассматриваемых ниже задач граничные условия выбирались полулинейными и после их аппроксимации имели вид:

$$\phi_i = \bar{\omega}_i(t^{n+1}, x_{1m}) u_{ml}^{n+1} - g_i(t^{n+1}, x_{1m}) = 0, \\ i = 1, 2 \text{ при } x_2 = 0, i = 6, 7 \text{ при } x_2 = 1.$$

Возможная схема расщепления для случая двух переменных:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + A \frac{\partial u}{\partial x} + B \frac{\partial u}{\partial y} = 0:$$

$$\beta_1 \left(\frac{\partial u}{\partial t} + \beta_1^{-1} A \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \beta_2 \left(\frac{\partial u}{\partial t} + \beta_2^{-1} B \frac{\partial u}{\partial y} \right) = 0,$$

$$\beta_1 + \beta_2 = 1, \beta \geq 0, \beta_2 \geq 0; u_{ml}^{n+1} = \beta_1 u_{1ml}^{n+1} + \beta_2 u_{2ml}^{n+1},$$

где u_{1ml}^{n+1} и u_{2ml}^{n+1} находятся из численного решения двух одномерных систем уравнений:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \beta_1^{-1} A \frac{\partial u}{\partial x} = 0 \text{ и } \frac{\partial u}{\partial t} + \beta_2^{-1} B \frac{\partial u}{\partial y} = 0.$$

В случае пространственной динамической задачи: $\frac{\partial u}{\partial t} + \sum_{k=1}^3 A_k \frac{\partial u_k}{\partial x_k} = 0$

матрицы имеют вид: $r_{ijkl} = \frac{1}{2}(q_{ijkl} + q_{jikl})$, $l \neq k$;

$u = \{v_1, v_2, v_3, \sigma_{11}, \sigma_{12}, \sigma_{13}, \sigma_{22}, \sigma_{23}, \sigma_{33}, U\}$ — вектор-столбец искомых величин.

$$A_1 = \begin{pmatrix} v_1 & 0 & 0 & -1/\rho & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & v_1 & 0 & 0 & -1/\rho & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & v_1 & 0 & 0 & -1/\rho & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -q_{1111} & -r_{1112} & 0 & v_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -q_{1211} & -r_{1212} & 0 & 0 & v_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -q_{1311} & -r_{2212} & 0 & 0 & 0 & v_1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -q_{2211} & -r_{1312} & 0 & 0 & 0 & 0 & v_1 & 0 & 0 & 0 \\ -q_{2311} & -r_{3212} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & v_1 & 0 & 0 \\ -q_{3311} & -r_{3312} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & v_1 & 0 \\ -\sigma_{11}/\rho & -\sigma_{12}/\rho & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & v_1 \end{pmatrix},$$

$$A_2 = \begin{pmatrix} v_2 & 0 & 0 & -1/\rho & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & v_2 & 0 & 0 & -1/\rho & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & v_2 & 0 & 0 & -1/\rho & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -r_{1112} & -q_{1122} & 0 & v_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -r_{1212} & -q_{1232} & 0 & 0 & v_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -r_{1312} & -q_{1322} & 0 & 0 & 0 & v_2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -r_{1222} & -q_{2222} & 0 & 0 & 0 & 0 & v_2 & 0 & 0 & 0 \\ -r_{2312} & -q_{2322} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & v_2 & 0 & 0 \\ -r_{3312} & -q_{3322} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & v_2 & 0 \\ -\sigma_{12}/\rho & -\sigma_{22}/\rho & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & v_2 \end{pmatrix},$$

$$A_3 = \begin{pmatrix} v_3 & 0 & 0 & -1/\rho & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & v_3 & 0 & 0 & -1/\rho & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & v_3 & 0 & 0 & -1/\rho & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -r_{1113} & -r_{1123} & -q_{1133} & v_3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -r_{1213} & -r_{1223} & -q_{1233} & 0 & v_3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -r_{1313} & -r_{1323} & -q_{1333} & 0 & 0 & v_3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -r_{2213} & -r_{2223} & -q_{2233} & 0 & 0 & 0 & v_3 & 0 & 0 & 0 \\ -r_{2313} & -r_{2323} & -q_{2333} & 0 & 0 & 0 & 0 & v_3 & 0 & 0 \\ -r_{3313} & -r_{3323} & -q_{3333} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & v_3 & 0 \\ -\sigma_{13}/\rho & -\sigma_{23}/\rho & -\sigma_{33}/\rho & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & v_3 \end{pmatrix}.$$

Одна из возможных сеточно-характеристических схем для численного решения приведенной системы может быть представлена в виде:

$$\begin{aligned}
 u_{mlp}^{n+1} &= u_{mlp}^n - \sigma_1 \Omega_1^{-1} \Lambda_1 \Delta_m u + \sigma_1^\gamma \Omega_1 |\Lambda_1|^\gamma \Omega_1 \Delta_m^2 u - \sigma_2 \Omega_2^{-1} \Lambda_1 \Delta_l u + \\
 &+ \sigma_2^\gamma \Omega_2 |\Lambda_2|^\gamma \Omega_2 \Delta_l^2 u - \sigma_3 \Omega_3^{-1} \Lambda_1 \Delta_p u + \sigma_3^\gamma \Omega_3 |\Lambda_3|^\gamma \Omega_3 \Delta_p^2 u, \\
 u_m &= 0,5(u_{m+1,l,p}^n - u_{m-1,l,p}^n), \\
 u_l &= 0,5(u_{m,l,p+1}^n - u_{m,l,p-1}^n), \\
 u_m^2 &= 0,5(u_{m+1,l,p}^n - 2u_{mlp}^n + u_{m-1,l,p}^n), \\
 u_l^2 &= 0,5(u_{m,l,p+1}^n - 2u_{mlp}^n + u_{m,l,p-1}^n), \\
 u_p^2 &= 0,5(u_{m,l,p+1}^n - 2u_{mlp}^n + u_{m,l,p-1}^n), \\
 h_k &(\tau h_k \text{ — шаги по времени и трем координатам; } k=1, 2, 3), \text{ или} \\
 u_{mlp}^{n+1} &= u_{mlp}^n + \sigma_1 \left[(\Omega_1^{-1} \Lambda_1^+ \Delta_m)_{mlp}^- \Delta_m^- u - (\Omega_1^{-1} \Lambda_1^+ \Omega_1)_{mlp}^+ \Delta_m^+ u \right]^n + \\
 &+ \sigma_2 \left[(\Omega_2^{-1} \Lambda_2^+ \Delta_m)_{mlp}^- \Delta_m^- u - (\Omega_2^{-1} \Lambda_2^+ \Omega_2)_{mlp}^+ \Delta_m^+ u \right]^n + \sigma_3 \left[(\Omega_3^{-1} \Lambda_3^+ \Delta_m)_{mlp}^- \Delta_m^- u - (\Omega_3^{-1} \Lambda_3^+ \Omega_3)_{mlp}^+ \Delta_m^+ u \right]^n, \\
 \Delta_l^\pm &= u_{m,l\pm 1,p} - u_{mlp}, \\
 \Delta_p^\pm &= u_{m,l,p\pm 1} - u_{mlp}.
 \end{aligned}$$

Схема имеет первый порядок точности при $\gamma = 1$ (что и было реализовано в работе), второй — при $\gamma = 2$; здесь явно выделен «демпфирующий» (вязкий) член, придающий схеме устойчивость и положительную (по Фридрихсу [5]) определенность (или монотонность — в одномерном случае); при реализации нет необходимости находить матрицы $\Lambda_k^\pm$; схему несложно гибридизировать (т. е., например, полагать $\gamma = 1$ в областях с большими градиентами параметров течения и $\gamma = 2$ — в «гладких» областях). Преимущество записи сеточно-характеристической схемы состоит в уменьшении количества арифметических действий.

Обсуждение и заключения. Построение численного алгоритма в граничных точках подробно описано в [8] для двумерного случая. При численном решении трехмерной задачи построение производится аналогично; так, например, в случае верхней и нижней границ, после скалярного умножения схемы на собственные векторы $(\omega^3)_i^n$ получим соотношения:

$$\begin{aligned}
 &+ \sigma_2 \left[(\Omega_2^{-1} \Lambda_2^+ \Omega_2)_{mlp}^- \Delta_l^- u - (\Omega_2^{-1} \Lambda_2^+ \Omega_2)_{mlp}^+ \Delta_l^+ u \right]^n \pm \sigma_3 (\lambda_i^3)_{mlp}^n (\omega_i^3)_{mlp}^n \Delta_l^\pm u; \quad i = 1, \dots, I, \\
 &+ \sigma_2 \left[(\Omega_2^{-1} \Lambda_2^+ \Omega_2)_{mlp}^- \Delta_l^- u - (\Omega_2^{-1} \Lambda_2^+ \Omega_2)_{mlp}^+ \Delta_l^+ u \right]^n \pm \sigma_3 (\lambda_i^3)_{mlp}^n (\omega_i^3)_{mlp}^n \Delta_l^\pm u; \quad i = 1, \dots, I,
 \end{aligned}$$

аппроксимирующие с первым порядком точности условия совместности

$$\omega_i^3 u_i + \lambda_i^3 \omega_i^3 u'_{\eta_3} = -\omega_i^3 (A_1 u'_{\eta_1} + A_2 u'_{\eta_2}).$$

В случае одномерной системы уравнений газодинамики:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + A \frac{\partial u}{\partial x} = 0$$

вектор искомых функций и матрица A имеют следующий вид [2]:

$$u = \begin{Bmatrix} \rho \\ u \\ \varepsilon \end{Bmatrix}, \quad A = \begin{Bmatrix} u & p & 0 \\ \rho^{-1} \frac{\partial p}{\partial s} & u & \rho^{-1} \frac{\partial p}{\partial \varepsilon} \\ 0 & p/\rho & u \end{Bmatrix},$$

где ρ — плотность, u — скорость, ε — плотность внутренней энергии газа.

Собственно, значения матрицы имеют вид:

$$\lambda_1 = u + c; \quad \lambda_2 = u; \quad \lambda_3 = u - c,$$

где c — скорость звука в газе; матрицы из собственных векторов, собственно, будут:

$$\Omega = \begin{Bmatrix} \omega_1 \\ \omega_2 \\ \omega_3 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \frac{\partial p}{\partial \rho} & \rho c & \frac{\partial p}{\partial \varepsilon} \\ p & 0 & -\rho^2 \\ p & -\rho e & \frac{\partial p}{\partial \rho} \end{Bmatrix}.$$

Список литературы

1. Рождественский, Б. Л. Системы квазилинейных уравнений и их приложения к газовой динамике / Б. Л. Рождественский, Н. Н. Яненко. — Москва : Наука, 1968. — 546 с.
2. Магомедов, К. М. Сеточно-характеристические методы / К. М. Магомедов, А. С. Холодов / 2-е изд. — Москва : Юрайт, 2017 г., — 312 с.
3. Куликовский, А. Г. Математические вопросы численного решения гиперболических систем уравнений / А. Г. Куликовский, Н. А. Погорелов, А. Ю. Семенов. — Москва : Физматлит, 2012 г. — 656 с.
4. Favorskaya, A. V. Innovation in Wavt Processes Modeling and Decision Making Grid-Charakteristic Method and Applications / A. V. Favorskaya, I. B. Petrov // Springer. — 2018. — 270 p.
5. Fridrichs, K. O. Symmetrics hyperbolic linear differential equation / К. О. Fridrichs // Communications on Pure and Applied Mathematics — 1954. — Vol. 7, no. 2. — P. 345—392.
6. Годунов, С. К. Разностный метод численного расчета разрывных решений уравнений гидродинамики / С. К. Годунов // Математический сборник. — 1959. — Т. 47 (89), вып. 3. — С. 271–306.
7. Петров, И. Б. Об использовании гибридизированных сеточно-характеристических схем для численного решения трехмерных задач динамики деформируемого твердого тела / И. Б. Петров, А. Г. Тарасов, А. С. Холодов // Журнал вычислительной математики и математической физики. — 1990. — Т. 30, № 8. — С. 1237–1244.
8. Петров, И. Б. Численное исследование некоторых динамических задач механики деформируемого твердого тела сеточно-характеристическим методом / И. Б. Петров, А. С. Холодов // Журнал вычислительной математики и математической физики. 1990. — Т. 30, № 8. — С. 1237–1244.

Поступила в редакцию 02.02.2023.

Поступила после рецензирования 01.03.2023.

Принята к публикации 02.03.2023.

Об авторах:

Петров Игорь Борисович, член-корреспондент РАН, доктор физико-математических наук, профессор, Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет) (РФ, 141701, Московская область, г. Долгопрудный, Институтский переулок, 9), Math-Net.ru, MathsciNet, eLibrary.ru, ORCID, ResearchGate, petrov@mipt.ru

Петров Дмитрий Игоревич, кандидат физико-математических наук, лаборатория прикладной вычислительной геофизики МФТИ, Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет) (РФ, 141701, Московская область, г. Долгопрудный, Институтский переулок, 9), Math-Net.ru, eLibrary.ru

Конфликт интересов:

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Все авторы прочитали и одобрили окончательный вариант рукописи.

УДК 004.85

Научная статья

<https://doi.org/10.23947/2587-8999-2023-6-1-70-76>**Машинное обучение в анализе влияния электромагнитного поля на скорость коррозии и солеотложения нефтепромыслового оборудования****Ш. Р. Хуснуллин¹ , К. Ф. Коледина^{1,2} , С. Р. Алимбекова³ , Ф. Г. Ишмуратов³ **¹Уфимский государственный нефтяной технический университет, Российская Федерация, г. Уфа, ул. Космонавтов, 1²Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН, Российская Федерация, г. Уфа, пр. Октября, 141³Уфимский университет науки и технологий, Российская Федерация, г. Уфа, ул. Карла Маркса, 12✉ shamil.khusnullin@gmail.com**Аннотация**

Введение. Образование солеотложений и коррозия нефтепромыслового оборудования на большинстве нефтяных месторождений в последние годы получила особую актуальность ввиду роста объемов добываемой нефти и увеличения ее обводненности. Отложение солей в пласте и скважинах приводит к снижению проницаемости нефтеносного пласта, дебита скважин. Целью работы является применение алгоритмов машинного обучения для моделирования воздействия электромагнитного поля на процессы солеотложений и коррозии. Предсказание результатов экспериментов позволит быстрее и точнее проводить опыты, устанавливающие влияние электромагнитных полей на процессы коррозии и отложения солей.

Материалы и методы. Для обучения моделей были использованы три группы данных, различающихся по составу изучаемого исходного модельного солевого раствора: воды Вынгапуровского и Приобского месторождений, а также водопроводная вода. Были рассмотрены следующие модели машинного обучения: линейная регрессия с регуляризацией Elastic-Net, метод k ближайших соседей, дерево решений, случайный лес и полносвязная нейросеть.

Результаты исследования. С помощью алгоритмов машинного обучения были смоделированы процессы воздействия электромагнитного поля на образования солеотложений и коррозию нефтепромыслового оборудования. Разработана программа на Python для предсказания выходных результатов экспериментов. Проведено моделирование с различными моделями и их параметрами.

Обсуждение и заключение. Из проведенных экспериментов установлено, что наилучшую точность предсказаний имеют дерево решений и случайный лес. Нейронные сети, напротив, предсказывают с наименьшей точностью. Связано это с тем, что данных в обучающих выборках слишком мало. С увеличением числа наблюдений стоит использовать нейросети различных архитектур.

Ключевые слова: солеотложение, электромагнитное воздействие, коррозия нефтепромыслового оборудования, методы множественной регрессии, машинное обучение, нейронная сеть, случайный лес.

Для цитирования. Машинное обучение в анализе влияния электромагнитного поля на скорость коррозии и солеотложения нефтепромыслового оборудования / Ш. Р. Хуснуллин, К. Ф. Коледина, С. Р. Алимбекова, Ф. Г. Ишмуратов // Computational Mathematics and Information Technologies. — 2023. — Т. 6, № 1. — С. 70–76. <https://doi.org/10.23947/2587-8999-2023-6-1-70-76>

Original article

Machine learning in the analysis of the electromagnetic field influence on the rate of oilfield equipment's corrosion and salt deposition**Sh. R. Khusnullin¹ , K. F. Koledina^{1,2} , S. R. Alimbekova³ , F. G. Ishmuratov³ **¹Ufa State Petroleum Technical University, 1, Kosmonavtov St., Ufa, Russian Federation²Institute of Petrochemistry and Catalysis of Russian Academy of Sciences, 141, October Ave, Ufa, Russian Federation³Ufa University of Science and Technology, 12, Karl Marx St., Ufa, Russian Federation✉ shamil.khusnullin@gmail.com

Abstract

Introduction. The formation of salt deposits and oilfield equipment's corrosion in most oil fields has become particularly relevant due to the increase in the volume of oil produced and the increase in its water content in recent years. The deposition of salts in the formation and wells leads to a decrease in the permeability of the oil reservoir, the flow rate of wells. The aim of the work is to use machine learning algorithms to simulate the effects of an electromagnetic field on the processes of salt deposition and corrosion. Prediction of experimental results will allow faster and more accurate experiments to establish the influence of electromagnetic fields on the processes of corrosion and salt deposition.

Materials and methods. Three groups of data were used, to train the models, differing in the composition of the studied initial model salt solution: the waters of the Vyngapurovsk's and Priobsk's deposits, as well as tap water. The following machine learning models were used: linear regression with Elastic-Net regularization, the k-nearest neighbors algorithm, the decision tree, the random forest and a fully connected neural network.

Results. The processes of electromagnetic field influence on the formation of salt deposits and corrosion of oilfield equipment were simulated with the help of machine learning algorithms. Python program has been developed to predict the output results of experiments. Modeling with various models and their parameters is carried out.

Discussion and conclusions. It was found that the decision tree and the random forest have the best accuracy of predictions, from the experiments conducted. This is due to the fact that there is too little data in the training samples. With the increase in the number of observations, it is worth using neural networks of various architectures.

Keywords: salt deposition, electromagnetic impact, oilfield equipment's corrosion, multiple regression methods, machine learning, neural network.

For citation. Machine learning in the analysis of the electromagnetic field influence on the rate of oilfield equipment corrosion and salt deposition / Sh. R. Khusnullin, K. F. Koledina, S. R. Alimbekova, F. G. Ishmuratov // Computational Mathematics and Information Technologies. — 2023. — Vol. 6, no. 1. — P. 70–76.

<https://doi.org/10.23947/2587-8999-2023-6-1-70-76>

Введение. В последнее время особенно остро стоит проблема образования солеотложений и коррозии нефтепромышленного оборудования на большей части активно разрабатываемых нефтяных месторождений. Это связано с наращиванием объемов добычи нефти и увеличением ее обводненности. Отложение солей в пласте и скважинах приводит к снижению проницаемости нефтеносного пласта, дебита скважин, увеличению эксплуатационных расходов и отказу глубинно-насосного оборудования [1].

В НИИ ТС «Пилот» проводились эксперименты по изучению влияния электромагнитного поля, генерируемого РВК, на коррозию конструкционной низкоуглеродистой стали и на кристаллизацию карбоната кальция. Было установлено, что воздействие ЭМП уменьшает общую массу малорастворимых солей, а также обеспечивает защиту от коррозии [2, 3].

В данной работе предлагается применение алгоритмов машинного обучения для моделирования воздействия ЭМП на кристаллизацию карбоната кальция и на процесс коррозии конструкционной стали. Объектом исследования стало влияние электромагнитных полей на процессы солеотложения и коррозии. Предметом изучения и анализа является возможность применения моделей машинного обучения для моделирования процессов солеотложения и коррозии под воздействием электромагнитных полей. Цель настоящего исследования — разработка программного обеспечения для моделирования экспериментов по взаимодействию электромагнитных полей на отложения солей и коррозию. Прогноз результатов даст возможность проще и быстрее проводить подобные эксперименты. Это позволит точнее установить влияние магнитного поля на отложения карбоната кальция и на скорость коррозии нефтепромышленного оборудования.

Материалы и методы. Экспериментальные исследования электромагнитного воздействия на процессы солеотложения и коррозии были проведены для воды Вынгапуровского и Приобского месторождений, а также для водопроводной воды [4]. Для обучения алгоритмов были использованы 3 группы данных, различающихся по составу изучаемого исходного модельного солевого раствора. Анализируемые данные включают в себя информацию о составе растворов, условиях проведения исследований (скорость потока, давление, температура), па-

раметрах электромагнитных полей, воздействующих на растворы. Выходные параметры, которые необходимо прогнозировать: скорость коррозии в потоке и статичном растворе, мм/год; распределение карбоната кальция по морфологии (кальцит, арагонит, ватерит). Для каждой группы отчетов применялись различные модели, так как в каждой задаче различные входные и выходные данные [5].

Для решения поставленной задачи машинного обучения в анализе влияния электромагнитного поля на скорость коррозии и солеотложения нефтепромыслового оборудования были применены алгоритмы обучения, рассмотренные ниже.

Результаты исследования.

1. Линейная регрессия с регуляризацией Elastic Net.

Представляет собой линейную зависимость между целевой переменной и признаками:

$$\hat{y} = w_0 + w_1 * x_1 + \dots + w_D * x_D = \langle x, w \rangle + w_0 \quad [6].$$

Для нахождения оптимальных весов, минимизирующих среднеквадратичную функцию потерь:

$$MSE = \frac{1}{N} * \sum_i^N (y^i - \hat{y}^i)^2. \quad (1)$$

На практике используется метод градиентного спуска.

Для борьбы с переобучением применяется метод регуляризации Elastic Net. В функцию потерь добавляется 1-ая и 2-ая нормы весов w :

$$L(y, \hat{y}, w) = \frac{1}{N} * \sum_i^N (y^i - \hat{y}^i)^2 + \lambda_1 \|w\|_1 + \lambda_2 \|w\|_2^2, \quad (2)$$

где λ_1 и λ_2 — коэффициенты регуляризации.

2. Метод k ближайших соседей.

Суть метода заключается в следующем: предсказание $\hat{y}$ для объекта вычисляется как среднее значение целевой переменной y среди k его ближайших соседей [7]:

$$\hat{y} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^k y^i. \quad (3)$$

Для нахождения расстояния между объектами используются различные метрики (функции расстояния):

$$\text{– евклидово расстояние: } \rho(a, b) = \sqrt{\sum_i (a_i - b_i)^2}; \quad (4)$$

$$\text{– манхэттенская метрика: } \rho(a, b) = \sum_i |a_i - b_i|; \quad (5)$$

$$\text{– косинусное расстояние: } \rho(a, b) = 1 - \frac{a * b}{\|a\| \|b\|}. \quad (6)$$

3. Решающие деревья.

Решающее дерево предсказывает значение целевой переменной с помощью применения последовательности простых решающих правил (которые называются предикатами). В каждом узле этого дерева находится предикат. Если он верен для текущего примера из выборки, осуществляется переход в правого потомка, если нет — в левого. Часто предикаты — это просто взятие порога по значению какого-то признака. В листьях записаны предсказания (например, значения целевой переменной y).

4. Случайный лес.

Это ансамбль моделей (композиция нескольких алгоритмов), где в качестве базового алгоритма используются деревья решений. В основе этого метода лежит бэггинг (англ. bagging, метаалгоритм, предназначенный для улучшения стабильности решения) [8]. Суть метода в следующем: из исходной выборки получают подвыборку той же размерности методом случайного выбора объектов. На каждой выборке обучается свое дерево решений, причем используются не все признаки объектов, а их случайное количество (метод случайных подпространств). Чтобы получить одно предсказание, усредняются предсказания всех моделей:

$$\hat{y}(x) = \frac{1}{k} (b_1(x) + \dots + b_k(x)). \quad (7)$$

5. Нейронная сеть.

Во всех трех задачах применялись сети следующей архитектуры: входной слой из D нейронов (количество входных параметров), скрытый слой и выходной слой, состоящий из m нейронов, по размерности целевого вектора $y = (y_1, \dots, y_m)$ [9].

Для обеспечения нелинейности преобразований применялась функция активации:

$$ReLU(x) = \max(x, 0). \quad (8)$$

6. Оценка качества моделей.

Для того чтобы определить, какая модель лучше всего аппроксимирует зависимость между признаками и зависимыми переменными, в задачах регрессии используются следующие критерии (метрики):

$$\text{– среднеквадратичная ошибка (MSE): } MSE = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (y_i - \hat{y}_i)^2; \quad (9)$$

$$\text{– коэффициент детерминации: } R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^N (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^N (y_i - \bar{y})^2}; \quad (10)$$

$$\text{– средняя абсолютная ошибка: } MAE = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |y_i - \hat{y}_i|. \quad (11)$$

В таблицах 1–3 приведены результаты применения моделей для трех групп экспериментов.

Таблица 1

Значения метрик для Вынгапуровского месторождения

Модель/ Метрика	Линейная регрессия	Метод k ближайших соседей	Дерево решений	Случайный лес	Нейронная сеть
MSE	0,01453	0,0133	0,0064	0,0065	20,6408
MAE	0,0839	0,0757	0,0467	0,0478	3,2109
R^2	–5,2844	–8,2677	0,3169	0,2266	–1,0221

Таблица 2

Значения метрик для Приобского месторождения

Модель/ Метрика	Линейная регрессия	Метод k ближайших соседей	Дерево решений	Случайный лес	Нейронная сеть
MSE	0,3073	0,2623	0,1435	0,1724	13,9461
MAE	0,2489	0,1972	0,1314	0,1724	2,4746
R^2	–18,8724	–2,1167	0,5364	0,1113	–0,9355

Таблица 3

Значения метрик для водопроводной воды

Модель/ Метрика	Линейная регрессия	Метод k ближайших соседей	Дерево решений	Случайный лес	Нейронная сеть
MSE	0,3232	0,2525	0,1799	0,1845	1,1029
MAE	0,4729	0,4022	0,3251	0,3362	0,8847
R^2	–6,9638	–1,7114	0,0378	–0,0283	–4,3788

На основе описанных алгоритмов разработана программа Predict — моделирование воздействия ЭМП на процессы солеотложения и коррозии на нефтепромысловом оборудовании [10] (рис. 1).

Прогноз Данные

Выберите данные: Месторождение_1

Входные данные:	
CaCl ₂ , г/л	0,567
MgCl ₂ · 6H ₂ O, г/л	0,9
NaCl, г/л	1,2
NaHCO ₃ , г/л	1,456
Частота тора, кГц	0
Частота шпули, кГц	220
Резонансная частота, кГц	0

Выберите модель: Случайный лес

Прогноз Сохранить данные

Выходные данные:	
Кальцит, %	0,72
Арагонит, %	0,016
Ватерит, %	0,127

Значения метрик:	
Средняя абсолютная ошибка (MAE)	0,05
Среднеквадратичная ошибка (MSE)	0,007
Коэффициент детерминации (R ²)	0,103

Пояснение: чем меньше MSE и MAE, тем лучше. Чем ближе R² к 1, тем лучше модель.

Рис. 1. Интерфейс программы Predict

Пользователь может ввести различные входные данные (состав раствора, частоты электромагнитных полей, наличие магнитов и т. д.) и получить выходные данные — распределение карбоната кальция по морфологии и/или скорость коррозии. Для предсказания могут применяться, по выбору пользователя, следующие методы машинного обучения: линейная регрессия, метод k ближайших соседей, дерево решений, случайный лес и нейронная сеть. Для выбора лучшей модели программа выводит показания метрик качества. В качестве языка программирования был выбран Python версии 3.10. Для использования моделей машинного обучения и обработки данных применялись библиотеки numpy, pandas, sklearn. Для работы с excel-файлами использовалась библиотека openpyxl.

На рис. 2 приведены графики истинных и предсказанных значений выходных параметров для Приобского месторождения, полученные методом случайного леса. Рассмотрены скорость коррозии в потоке (истинное и прогнозируемое значение); распределение карбоната кальция в виде кальцита (истинное и прогнозируемое значение). Как видно из приведенного графика, алгоритм случайного леса довольно хорошо аппроксимирует выходные данные.

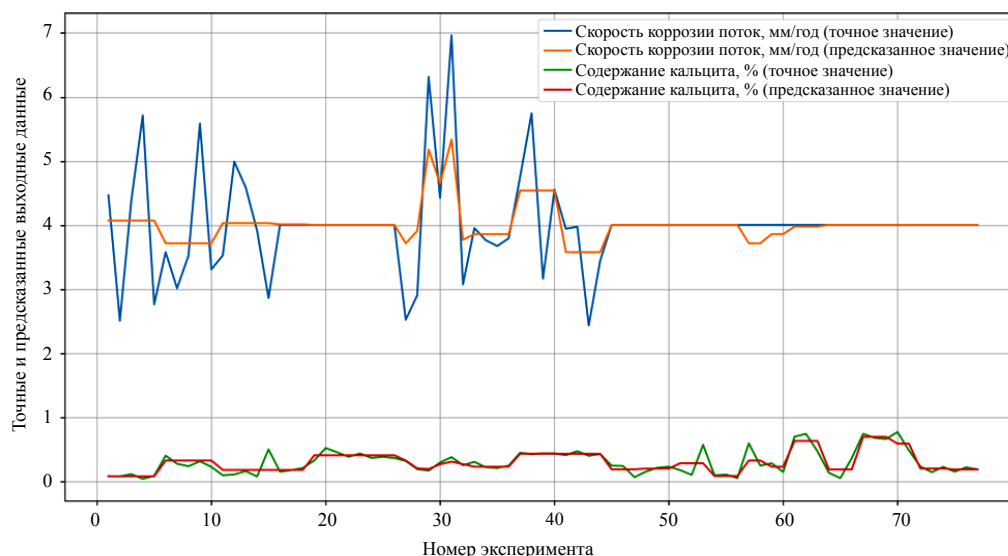


Рис. 2. График истинных и предсказанных значений методом случайного леса

Обсуждение и заключения. Как видно из результатов исследования (табл. 1–3, рис. 2), дерево решений и случайный лес имеют наименьшие значения метрик MSE и MAE и значения R^2 , наиболее близкие к 1 во всех трех задачах. Нейросети, напротив, имеют самые худшие показатели ошибок. Связано это с тем, что данных для обучения слишком мало.

Для анализа такого числа данных целесообразно использовать деревья решений и случайный лес. При увеличении количества наблюдений стоит перейти к использованию нейросетей, а также использовать иные архитектуры (с большим количеством скрытых слоев, рекуррентные сети и т. д.).

Список литературы

1. Koledina, K. F. Solving the problem of multi-criteria optimization of the synthesis reaction of benzylalkyl esters by the method of “ideal” point and lexicographic ordering / K. F. Koledina, A. A. Alexandrova // Computational mathematics and information technologies. — 2022. — Vol. 1, no. 1. — P. 12–19. <https://doi.org/10.23947/2587-8999-2022-1-1-12-19>
2. Shaimardanova, G. F. Genetic algorithm for solving the inverse problem of chemical kinetics / G. F. Shaimardanova, K. F. Koledina // Computational mathematics and information technologies. — 2022. — Vol. 1, no. 1. — P. 41–49. <https://doi.org/10.23947/2587-8999-2022-1-1-41-49>
3. Влияние электромагнитного поля на коррозию низкоуглеродистой стали в водных минерализованных средах и на кристаллизацию карбоната кальция в присутствии ионов железа(II) / С. Р. Алимбекова, Ф. Г. Ишмуратов, В. В. Носов [и др.] // SOCAR Proceedings Special Issue. — 2021. — № 1. — С. 116–124. <http://dx.doi.org/10.5510/OGP2021SI100515>
4. Физические методы предупреждения солеотложения при нефтедобыче / С. Р. Алимбекова, Р. Н. Бахтизин, А. И. Волошин [и др.] // Нефтегазовое дело. — 2019. — № 6. — С. 31–38. <http://ngdelo.ru/files/ngdelo/2019/6/ngdelo-6-2019-p31-38.pdf>
5. Weisberg, S. Applied linear regression / S. Weisberg // New Jersey : John Wiley & Sons. — 2005. — 352 p.
6. Хуснуллин, Ш. Р. Машинное обучение в анализе влияния частоты электромагнитного поля при различных скоростях потока раствора на скорость коррозии / Ш. Р. Хуснуллин, К. Ф. Коледина, С. Р. Алимбекова // В сборнике: Технические и технологические системы. Материалы тринадцатой Международной научной конференции. Краснодар. — 2022. — С. 462–464.
7. Sun, S. An adaptive k-nearest neighbor algorithm / S. Sun, R. Huang // IEEE. — 2010. — Vol. 1. — P. 91–94.
8. Чистяков, С. П. Случайные леса: обзор // Труды Карельского научного центра Российской академии наук. — 2013. — №. 1. — С. 117–136.
9. Горбачевская, Е. Н. Классификация нейронных сетей // Вестник Волжского университета им. В. Н. Татищева. — 2012. — №. 2 (19). — С. 128–134.
10. Программа моделирования воздействия электромагнитного поля на процессы солеотложения и коррозии на нефтепромысловом оборудовании (Predict) / Хуснуллин Ш. Р., Коледина К. Ф., Алимбекова С. Р. [и др.]. // Свидетельство о регистрации программ для ЭВМ от 19 января 2023. — № 2023611354.

Поступила в редакцию 08.02.2023.

Поступила после рецензирования 01.03.2023.

Принята к публикации 02.03.2023.

Об авторах:

Хуснуллин Шамиль Рамилевич, студент кафедры информационных технологий и прикладной математики Уфимского государственного нефтяного технологического университета (РФ, 450064, г. Уфа, ул. Космонавтов, 1), кафедра «Информационные технологии и прикладная математика», [ORCID](https://orcid.org/0009-0001-9000-1515), shamil.khusnullin15@gmail.com

Коледина Камила Феликсовна, доктор физико-математических наук, профессор кафедры информационных технологий и прикладной математики Уфимского государственного нефтяного технологического университета (РФ, 450064, г. Уфа, ул. Космонавтов, 1), старший научный сотрудник Института нефтехимии и катализа УФИЦ РАН (РФ, 450075, г. Уфа, пр. Октября, 141), [ORCID](https://orcid.org/0009-0001-9000-1515), koledinakamila@mail.ru

Алимбекова Софья Робертовна, с.н.с. ИЦ «Пилот», Уфимский университет науки и технологий (РФ, 450008, г. Уфа, ул. Карла Маркса, 12), [ORCID](#), ms.sofia.al@gmail.com

Ишмуратов Фарид Гумерович, зав. лабораторией МНИЛ НХ, Уфимский университет науки и технологий (РФ, 450008, г. Уфа, ул. Карла Маркса, 12), [ORCID](#), farid_ishmuratov@mail.ru

Заявленный вклад соавторов:

Хуснуллин Шамиль Рамилевич — подготовка данных, обучение алгоритмов машинного обучения. Коледина Камила Феликсовна — консультация по методам множественной регрессии. Алимбекова Софья Робертовна — предоставление исходных данных. Ишмуратов Фарид Гумерович — предоставление исходных данных.

Конфликт интересов

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Все авторы прочитали и одобрили окончательный вариант рукописи.

УДК 004.94

Научная статья

<https://doi.org/10.23947/2587-8999-2023-6-1-77-82>**Прогнозирование кинетики сложных процессов люминесценции на Python**С. В. Слепнёв¹ , К. Ф. Коледина^{1,2}  ¹Уфимский государственный нефтяной технический университет, Российская Федерация, г. Уфа, ул. Космонавтов, 1²Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН, Российская Федерация, г. Уфа, пр. Октября, 141 koledinakamila@mail.ru**Аннотация**

Введение. На сегодняшний день полиарилефталиды (ПАФ) находят широкое применение в оптоэлектронике. При этом реакции, протекающие при синтезе полиарилефталидов, имеют сложный характер, который до сих пор не удалось описать с помощью математических моделей. В связи с этим, невозможно использовать ПАФ во многих процессах. При этом ПАФ обладают люминесценцией, хорошими оптическими и электрофизическими свойствами. Выяснение механизмов возникновения люминесцирующих состояний ПАФ представляет как фундаментальный, так и практический интерес. В связи со сложностью расчета кинетики интенсивности свечения полиарилефталидов с помощью известных математических моделей была поставлена цель исследования — построить с помощью методов машинного обучения систему, прогнозирующую значения люминесценции в зависимости от температуры и времени нагревания.

Материалы и методы. Подготовлены к вычислениям экспериментальные данные, обосновано использование методов «случайный лес» и «градиентный бустинг», выбран способ подбора гиперпараметров данных моделей и обоснована целесообразность его использования, построены оптимальные модели и получены предсказания.

Результаты исследования. Разработан алгоритм предсказания интенсивности свечения полиарилефталидов. Используя методы машинного обучения на экспериментальных данных, были определены ключевые гиперпараметры системы и достигнута средняя точность предсказания значений — 80 %.

Обсуждение и заключения. Прогнозы высокой точности позволят предсказывать, как будут реагировать на внешнее воздействие продукты, включающие в свой состав полиарилефталиды. В работе представлено два метода решения задачи, так как они показали наилучшие результаты.

Ключевые слова: Python, люминесценция, методы машинного обучения, случайный лес, градиентный бустинг.

Для цитирования. Слепнёв, С. В. Прогнозирование кинетики сложных процессов люминесценции на Python / С. В. Слепнёв, К. Ф. Коледина // Computational Mathematics and Information Technologies. — 2023. — Т. 6, № 1. — С. 77–82. <https://doi.org/10.23947/2587-8999-2023-6-1-77-82>

Original article

Predicting the kinetics of complex luminescence processes in PythonS. V. Slepnev¹ , K. F. Koledina^{1,2}  ¹Ufa State Petroleum Technical University, 1, Kosmonavtov str., Ufa, Russian Federation²Institute of Petrochemistry and Catalysis of the Russian Academy of Sciences, 141, October Ave, Ufa, Russian Federation koledinakamila@mail.ru

Abstract

Introduction. Polyarylene phthalides (PAF) are widely used in optoelectronics today. The reactions occurring during the synthesis of polyarylene phthalides have a complex character, which has not yet been described using mathematical models. In this regard, it is impossible to use PAF in many processes. Polyarylene phthalides have luminescence, good optical and electrophysical properties. The elucidation of the mechanisms of the occurrence of luminescent states of PAF is of both fundamental and practical interest.

The elucidation of the mechanisms of the occurrence of luminescent states of PAF is of both fundamental and practical interest. Due to the complexity of calculating the kinetics of the luminescence intensity of polyarylene phthalides using known mathematical models, the aim of the study was to build a system using machine learning methods that predicts luminescence values depending on temperature and heating time.

Materials and methods. Experimental data have been prepared for calculations, the use of “random forest” and “gradient boosting” methods has been justified, a method for selecting hyperparameters of these models has been selected and the expediency of its use has been justified, optimal models have been constructed and predictions have been obtained.

The results of the study. An algorithm for predicting the luminescence intensity of polyarylene phthalides has been developed. Using machine learning methods based on experimental data, the key hyperparameters of the system were determined and the average accuracy of predicting values was achieved — 80 %.

Discussion and conclusions. High-accuracy forecasts will allow predicting how products containing polyarylene phthalides will react to external influences. The paper presents two methods for solving the problem, as they showed the best results.

Keywords: Python, luminescence, machine learning methods, random forest, gradient boosting.

For citation. Slepnev, S. V. Forecasting the kinetics of complex luminescence processes in Python / S. V. Slepnev, K. F. Kaledina // Computational Mathematics and Information Technologies. — 2023. — Vol. 6, no. 1. — P. 77–82. <https://doi.org/10.23947/2587-8999-2023-6-1-77-82>

Введение. На сегодняшний день органические полимерные материалы находят широкое применение в оптоэлектронике. Одной из разновидностей полимеров, пригодных для этих целей, могут быть полиарилефталиды (ПАФ). ПАФ отличаются высокой термо- и хемостойкостью, высокими пленкообразующими свойствами. При этом ПАФ обладают люминесценцией, хорошими оптическими и электрофизическими свойствами. Выяснение механизмов возникновения люминесцирующих состояний ПАФ представляет как фундаментальный, так и практический интерес. Предполагается, что люминесценция ПАФ обусловлена образованием активных интермедиатов при энергетическом воздействии на полимер, однако их химическая природа и свойства совершенно не изучены [1].

Так как реакции, протекающие при синтезе полиарилефталидов, имеют сложный характер, совершенно очевидна необходимость подробных исследований в этой практически неизученной области. Однако, несмотря на исследования и проводимые эксперименты [1–3], так и не была построена математическая модель, описывающая поведение свечения полиарилефталидов.

В связи со сложностью расчета кинетики интенсивности свечения полиарилефталидов с помощью известных математических моделей [2, 3], была поставлена цель — построить с помощью методов машинного обучения систему, прогнозирующую значения люминесценции в зависимости от температуры и времени нагревания.

Для реализации цели были поставлены следующие задачи:

- подготовить экспериментальные данные для расчетов;
- проанализировать алгоритмы машинного обучения и создать программу с применением наиболее оптимальных методов;
- подобрать наиболее удачные гиперпараметры для моделей.

Материалы и методы. Полиарилефталиды — тип ароматических полимеров. Предполагается, что люминесценция полиарилефталидов обусловлена образованием активных интермедиатов при энергетическом воздействии на полимер. В экспериментальных исследованиях температуру нагревания пленки

полиарилфталидов авторы меняли в диапазоне от 298 до 460 К в течение нескольких часов, используя различные скорости контролируемого нагрева и охлаждения пленки полиарилфталидов. Ими было установлено, что температурное воздействие на пленку приводит к возникновению долго затухающего свечения — рекомбинационной люминесценции [1].

Для накопления стабильных ион-радикалов пленку ПАФ облучали нефiltroванным светом в течение 10 минут (лампа 100 Вт), после чего оставляли при температуре 298 К на 8 часов. Температуру пленки ПАФ меняли в диапазоне от 298 до 460 К в течение нескольких часов, используя различные скорости контролируемого нагрева и охлаждения пленки ПАФ.

Данные по характеристикам индивидуальных полиарилфталидов представлены следующими категориями: время, температура, интенсивность свечения. Всего было 20 экспериментов, 200 значений по каждой характеристике.

На полученных данных были опробованы различные методы машинного обучения и выбраны наиболее подходящие для последующего улучшения модели. Подбор гиперпараметров реализован через рандомизированный поиск по параметрам, каждый из которых выбирается из распределения по возможным значениям.

Случайный лес. Алгоритм случайного леса (Random Forest) — универсальный алгоритм машинного обучения, суть которого состоит в использовании ансамбля решающих деревьев. Само по себе решающее дерево предоставляет крайне невысокое качество классификации, но из-за большого их количества результат значительно улучшается [4].

По сравнению с другими методами машинного обучения, теоретическая часть алгоритма Random Forest проста. Нет большого объема теории, необходима только формула итогового классификатора $a(x)$:

$$a(x) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N b_i(x), \quad (1)$$

где N — количество деревьев; i — счетчик для деревьев; b — решающее дерево; $a(x)$ — сгенерированная на основе данных выборка.

Однако, несмотря на универсальность, у данного метода наблюдается ряд существенных недостатков [5]:

- сложность интерпретации;
- случайный лес не умеет экстраполировать;
- алгоритм склонен к переобучению на сильно зашумленных данных;
- для данных, включающих категориальные переменные с различным количеством уровней, случайные леса предвзяты в пользу признаков с большим количеством уровней;
- большой размер получающихся моделей. Требуется $O(N \cdot C)$ памяти для хранения модели, где C — число деревьев.

Градиентный бустинг. Это метод машинного обучения, который создает решающую модель прогнозирования в виде ансамбля слабых моделей прогнозирования, обычно деревьев решений. Он строит модель поэтапно, позволяя оптимизировать произвольную дифференцируемую функцию потерь [6–8].

Пусть L — дифференцируемая функция потерь, а алгоритм $a(x)$ представляет собой композицию базовых алгоритмов:

$$a(x) = a_k(x) = b_1(x) + \dots + b_k(x), \quad (2)$$

где базовый алгоритм b_k обучается так, чтобы улучшить предсказания текущей композиции:

$$b_k = \arg \min \sum_{i=1}^N L(y_i, a_{k-1}(x_i) + b(x_i)). \quad (3)$$

Модель b_0 выбирается так, чтобы минимизировать потери на обучающей выборке:

$$b_0 = \arg \min \sum_{i=1}^N L(y_i, b(x_i)). \quad (4)$$

Для построения базовых алгоритмов на следующих шагах рассмотрим разложение Тейлора функции потерь L до первого члена в окрестности точки $(y_i, a_{k-1}(x_i))$:

$$L(y_i, a_{k-1}(x_i)) = L(y_i, a_{k-1}(x_i)) + b(x_i) g_i^{k-1}. \quad (5)$$

Избавившись от постоянных членов, можно получить оптимизационную задачу:

$$b_k \approx \arg \min \sum_{i=1}^N b(x_i) g_i^{k-1}. \quad (6)$$

На каждой итерации базовые алгоритмы b_k обучаются предсказывать значения антиградиента функции потерь по текущим предсказаниям композиции.

К основным недостаткам данного метода можно отнести подверженность переобучению и систему голосования оценщиков. Голосование оценщиков в градиентном бустинге происходит неравноправно. Одни оценщики имеют более высокий вес, чем другие. Как правило, голос самого первого обученного оценщика имеет самый минимальный вес, а последний оценщик имеет самый большой вес при голосовании.

Результаты исследования. Решение задачи регрессии осуществлялось с помощью языка программирования Python, а оценка точности решения — через коэффициент детерминации, который рассчитывается по формуле:

$$R^2 = 1 - \frac{S_{res}}{S_{tot}}, \quad (7)$$

где S_{res} — сумма квадратов остаточных ошибок, а S_{tot} — общая сумма ошибок.

На рис. 1, 2 приведены результаты моделирования кинетики интенсивности свечения ПАФ в зависимости от изменения температуры. Красной кривой показаны экспериментальные данные интенсивности свечения после воздействия температуры (синяя пунктирная кривая по вспомогательной вертикальной оси).

На рис. 1 приведено моделирование интенсивности методом градиентного бустинга (зеленая кривая). На рис. 2 приведено моделирование интенсивности методом случайного леса (зеленая кривая).

Коэффициент детерминации, при использовании градиентного бустинга, равен 83 %, а в случае применения случайного леса — 88 %.

Как и предполагалось, результаты получились немного отличными друг от друга в силу различия методов. При использовании метода градиентного бустинга предсказание оказывается менее точным, и пики прогнозируются в те моменты времени, когда их не было. В случае случайного леса имеются предсказания, которые лежат ближе к экспериментальным данным. Поскольку градиентный бустинг справляется с предсказанием температуры хуже, это влияет на предсказательную способность всей модели. Такой результат может быть обоснован «неидеальным» подбором гиперпараметров и скачкообразным изменением интенсивности свечения, что затрудняет определение направления градиента функции.

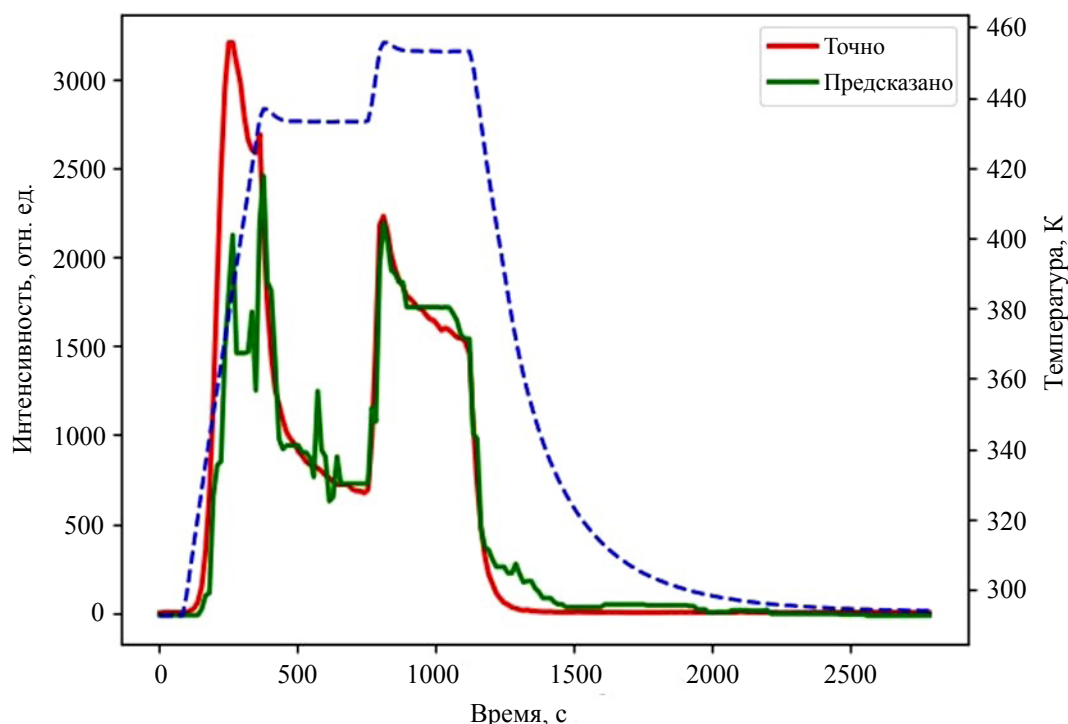


Рис. 1. Моделирование кинетики интенсивности свечения ПАФ методом «Градиентный бустинг»

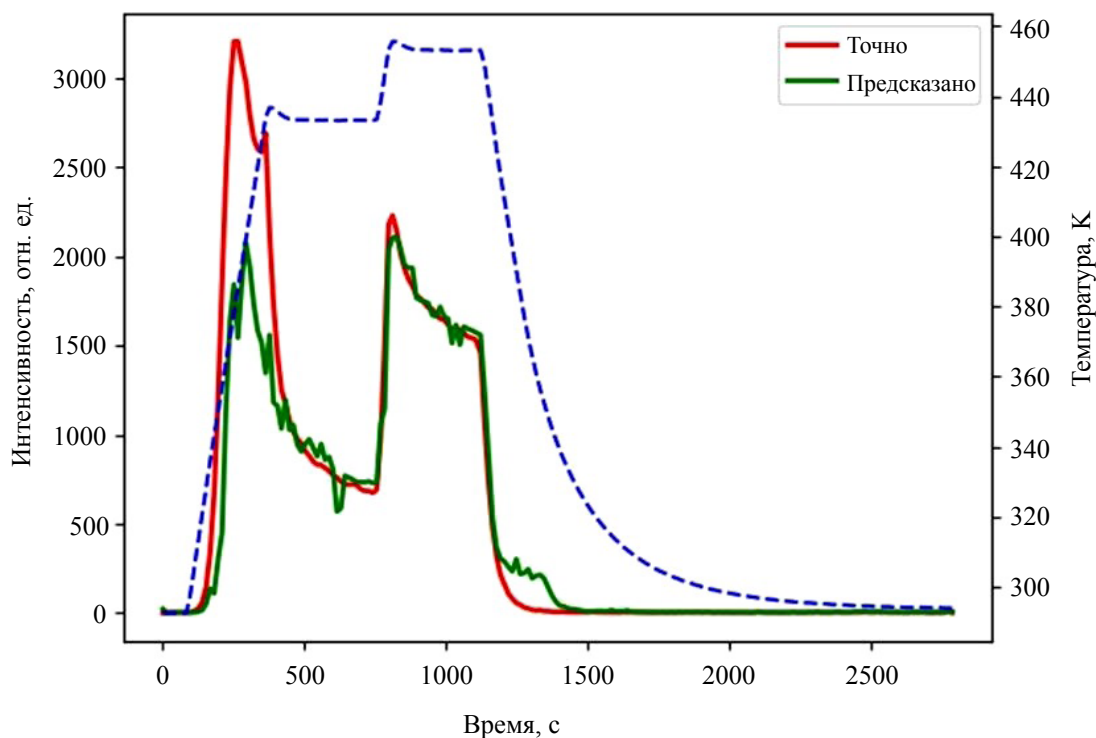


Рис. 2. Моделирование кинетики интенсивности свечения ПАФ методом «Случайный лес»

Обсуждение и заключения. Результат, полученный в ходе решения задачи прогнозирования *интенсивности свечения* полиарилефталидов актуален для применения в промышленных и лабораторных процессах. Несмотря на высокую предсказательную способность данной модели, она имеет свойство часто ошибаться при предсказании пиков, что требует дальнейшей доработки. Для уменьшения погрешности моделирования можно прибегнуть к комбинированию подходов и использованию иных методов для получения большей точности. Дополнительным способом улучшения модели также является более точный подбор гиперпараметров. Он, в свою очередь, требует высоких вычислительных мощностей, поскольку использует перебор всех возможных сочетаний и для текущей задачи может осуществляться неделями. Потенциальным решением проблемы может стать предварительный анализ данных с помощью генетических алгоритмов для поиска экстремумов и последующая передача данных для обучения алгоритмам машинного обучения.

Список литературы

1. Овчинникова, М. Ю. Кинетическая модель термостимулированной люминесценции пленок полидифениленфталидов / М. Ю. Овчинникова, В. А. Антипин, С. Л. Хурсан // Кинетика и катализ. — 2019. — Т. 60, № 5. — С. 547–554.
2. Koledina, K. F. Solving the problem of multi-criteria optimization of the synthesis reaction of benzylalkyl esters by the method of “ideal” point and lexicographic ordering / K. F. Koledina, A. A. Alexandrova // Computational mathematics and information technologies. — 2022. — Vol. 1., no. 1. — P. 12–19. [Doi 10.23947/2587-8999-2022-1-1-12-19](https://doi.org/10.23947/2587-8999-2022-1-1-12-19)
3. Shaimardanova, G. F. Genetic algorithm for solving the inverse problem of chemical kinetics / G. F. Shaimardanova, K. F. Koledina // Computational mathematics and information technologies. — 2022. — Vol. 1, no. 1. — P. 41–49. [Doi 10.23947/2587-8999-2022-1-1-41-49](https://doi.org/10.23947/2587-8999-2022-1-1-41-49)
4. Chistyakov, S. P. Random forests: an overview // Proceedings of the Karelian Scientific Center of the Russian Academy of Sciences. — 2013. — No. 1. — P. 117–136.
5. Брантон С. Л., Куц Дж. Н. Анализ данных в науке и технике / пер. с англ. А. А. Слинкина. — Москва : ДМК Пресс, 2021. — 574 с.
6. Muller, A. Introduction to Machine Learning using Python / A. Muller, S. Guido // O'Reilly. — 2016. — 340 p.
7. Sun, S. An adaptive k-nearest neighbor algorithm / S. Sun, R. Huang // IEEE. — 2010. — Vol. 1. — P. 91–94.

8. Орельен Жерон Прикладное машинное обучение с помощью Scikit-Learn и TensorFlow. — Москва : Диалектика, 2018. — 690 с.

Поступила в редакцию 10.02.2023.

Поступила после рецензирования 02.03.2023

Принята к публикации 03.03.2023.

Об авторах:

Сергей Вячеславович Слепнёв, студент кафедры информационных технологий и прикладной математики Уфимского государственного нефтяного технологического университета (РФ, 450064, г. Уфа, ул. Космонавтов, 1). Кафедра «Информационных технологий и прикладной математики», [ORCID](#), 14b59b59@gmail.com

Коледина Камила Феликсовна, доктор физико-математических наук, доцент кафедры информационных технологий и прикладной математики Уфимского государственного нефтяного технологического университета (РФ, 450064, г. Уфа, ул. Космонавтов, 1), научный сотрудник Института нефтехимии и катализа Российской академии наук (РФ, 450075, г. Уфа, проспект Октября, 141), [ORCID](#), koledinakamila@mail.ru

Заявленный вклад соавторов:

Слепнёв Сергей Вячеславович — разработка программы и реализация алгоритма. Коледина Камила Феликсовна — формализация задачи, тестирование, разработка спецификации.

Конфликт интересов.

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Все авторы прочитали и одобрили окончательный вариант рукописи.

УДК 519.25

Научная статья

<https://doi.org/10.23947/2587-8999-2023-6-1-83-89>**Прогнозирование тенденций развития временных рядов с помощью оценки медианы Ходжеса-Лемана****В. В. Мисюра¹  , Е. В. Мисюра² **¹Донской государственный технический университет, Российская Федерация, г. Ростов-на-Дону, пл. Гагарина, 1²Российский экономический университет им. Плеханова, Институт цифровой экономики и информационных технологий, Российская Федерация, г. Москва, Стремянный переулок, 36 vvmisyura2011@gmail.com**Аннотация**

Введение. Получение достоверных прогнозов, как в тенденции развития процесса, так и в его численном выражении является актуальной научной проблемой. Отсутствие стационарности в развитии временных рядов, малые выборки, наличие выбросов, скачков не позволяют найти оценки параметров модели, обладающих хорошими свойствами статистических оценок. Одним из средств, позволяющим решить указанные проблемы, является применение порядковых или робастных статистик. Научные монографии и специальные главы в книгах по математической статистике содержат глубокую и обширную теорию по исследованию свойств порядковых статистик, которые являются обоснованием их применения в методах прогнозирования. Целью настоящей работы является разработка и верификация метода получения одношаговых прогнозов тенденций развития временных рядов, основанного на устойчивых статистических оценках.

Материалы и методы. Разрабатывается метод получения одношаговых прогнозов тенденций развития временных рядов, основанных на построении доверительных интервалов выборочной устойчивой оценки Ходжеса-Лемана по средним Уолша. В частности, с помощью медианы Ходжеса-Лемана решается проблема малых выборок, полученных при выполнении процедуры сдвига окна временного ряда. Подробно рассматривается предложенный метод: даются основные определения, теоретическое обоснование метода, формулы расчета, подробное описание алгоритма, приводятся формулы расчета метрики качества прогнозов.

Результаты исследования. Метод получил реализацию в вычислительном эксперименте на примере прогнозирования спотовой цены на нефть марки Urals. Приведены результаты вычислительного эксперимента. Параметры предложенного метода могут быть настроены так, чтобы получать достоверные одношаговые прогнозы.

Обсуждение и заключения. Предложенный метод показал свою эффективность на экспериментальных данных и может быть использован как самостоятельный способ построения одношаговых прогнозов тенденций развития временных рядов. Дальнейшее развитие метода предполагает усовершенствование вычислительных процедур и верификацию в случае наличия скачков в динамике временного ряда

Ключевые слова: порядковая статистика, случайная величина, случайный процесс, медиана, медиана Ходжеса-Лемана, прогнозирование, тренд, средняя абсолютная ошибка.

Для цитирования. Мисюра, В. В. Прогнозирование тенденций развития временных рядов с помощью оценки медианы Ходжеса-Лемана / В. В. Мисюра, Е. В. Мисюра // Computational Mathematics and Information Technologies. — 2023. — Т. 6, № 1. — С. 83–89. <https://doi.org/10.23947/2587-8999-2023-6-1-83-89>

Original article

Forecasting trends in the development of time series by estimating the Hodges-Lehman median**V. V. Misyura¹  , E. V. Misyura² **¹Don State Technical University, 1, Gagarin Sq., Rostov-on-Don, Russian Federation²Russian University of Economics named after Plekhanova, Institute of Digital Economy and Information Technologies, 36, Stremyanny Lane, Moscow, Russian Federation vvmisyura2011@gmail.com

Abstract

Introduction. The lack of stationarity in the time series' development, small samples, the outliers presence, jumps do not allow to find estimates of model parameters that have good properties of statistical estimates and, as a result, to find reliable forecasts, both in the development trend of the process and in its numerical expression. The means to solve these problems is the use of ordinal or robust statistics. Scientific monographs and special chapters in books on mathematical statistics contain a deep and extensive theory on the study of the properties of ordinal statistics, which are the justification for their application in forecasting methods. The aim of the work is to develop and verify method for obtaining one-step forecasts of trends in the development of time series based on stable statistical estimates.

Materials and methods. The article presents the results of the development of a method for obtaining one-step forecasts of trends in the development of time series based on the construction of confidence intervals of a selective stable Hodges-Lehman estimate based on Walsh averages. In particular, the Hodges-Lehman median is used to solve the problem of small samples obtained during the procedure of shifting the time series window. The proposed method is considered in detail in the article: the basic definitions, the theoretical justification of the method, calculation formulas, a detailed description of the algorithm, formulas for calculating the quality metric of forecasts are given.

The results of the study. The method was implemented in computational experiment using the example of forecasting the Urals crude oil's spot price. The article presents the computational experiment's results. The parameters of the proposed method can be configured to obtain reliable one-step forecasts.

Discussion and conclusions. The method proposed in the article has shown its effectiveness on experimental data and can be used as an independent method for constructing one-step forecasts of trends in the development of time series. Further development of the method involves the improvement of computational procedures, verification of the method in case of jumps in the dynamics of the time series.

Keywords: ordinal statistics, random variable, random process, median, Hodges-Lehman medians, forecasting, trend, average absolute error.

For citation. Misyura, V. V. Forecasting trends in the development of time series by estimating the Hodges-Lehman median / V. V. Misyura, E. V. Misyura. // Computational Mathematics and Information Technologies. — 2023. — Vol. 6, no. 1. — P. 83–89. <https://doi.org/10.23947/2587-8999-2023-6-1-83-89>

Введение. Существует большое количество методов и способов прогнозирования, в которых используются математические модели случайного процесса, и статистические оценки параметров модели, с помощью которых модель настраивается на конкретную реализацию. Однако отсутствие стационарности в развитии процесса, делает невозможным использование одной модели на протяжении всего периода прогнозирования. К нестационарности следует добавить малые выборки, наличие выбросов, недостаточность априорной информации. Все это не позволяет найти оценки параметров модели, обладающих хорошими свойствами статистических оценок. Такие модели, в которых параметры недостаточно хорошо определены, называют моделями с неопределенными параметрами. Одним из средств, позволяющим в некоторой степени снять неопределенность в случаях применения малых и засоренных выборок при настройке параметров модели, являются робастные статистики. Под робастными статистиками обычно понимаются порядковые и знаковые статистики.

Порядковые статистики широко используются в статистической практике. Для них разработана глубокая и обширная теория, как при конечных объемах выборки, так и в асимптотике. На использовании порядковых статистик основаны многие статистические процедуры оценивания параметров и проверки статистических гипотез. Порядковым статистикам посвящены научные монографии и специальные главы в книгах по математической статистике [1–3]. Предложенный подход к прогнозированию тенденции развития случайных процессов во времени обоснован свойствами порядковых статистик.

Исследование посвящено анализу временных рядов с целью предсказания тенденции их развития во времени. В статье развивается идея прогнозирования тенденций развития временных рядов, предложенная в [4] и основанная на применении оценок порядковых статистик. В работе [4] сделана успешная попытка прогнозирования тен-

денции поведения финансовых индексов с помощью робастных статистик, а именно использование медианных оценок для вычисления меры рассеяния вокруг центра выборки. В статье предлагается решить проблемы подбора весовых коэффициентов и малых выборок при выполнении процедуры сдвига окна временного ряда с помощью построения доверительных интервалов выборочной устойчивой оценки Ходжеса-Лемана по средним Уолша.

Материалы и методы.

Метод прогнозирования тенденции развития случайного процесса во времени.

Будем рассматривать временной ряд как реализацию случайного процесса $\{X_t, 0 \leq t \leq T\}$. Случайную последовательность $\{h_t \leq T\}$ получаем, используя формулу, $h_t = \ln(X_t/X_{t-1})$, где X_t — наблюдаемый уровень временного ряда. Предположим, что X_{i+1} , $i=1, 2, \dots, T$ может иметь три типа направления изменения числового значения: падение (-1) ; сохранение (0) ; рост тренда (1) .

Функция, которая позволит прогнозировать тенденцию поведения временного ряда на один временной период, строится по следующей формуле:

$$\text{Trend}_i = \begin{cases} -1, \theta_+^i < 0, \\ 0, (\theta_+^i > 0) \& (\theta_-^i < 0), \\ 1, \theta_-^i > 0, \end{cases} \quad (1)$$

где θ_-^i и θ_+^i — пороговые переменные функции.

Пороговые переменные $\theta_-^{i+\tau}$ и $\theta_+^{i+\tau}$ для вычисления одношагового прогноза тенденции развития временного ряда предлагается вычислять как границы доверительного интервала выборочной порядковой статистики случайных последовательностей $\{h_p, h_{i+1}, \dots, h_{i+\tau-1}\}$, $i=1, \dots, T-\tau+1$, где некоторое число $1 < \tau < T$ определяет ширину окна процедуры сдвига временного ряда h_k , $k=1, \dots, T$.

Значения случайных величин $H_{(1)}, H_{(2)}, \dots, H_{(n)}$ называют порядковыми статистиками, если они соответствуют случайным величинам, входящим в выборку $H_1, H_2, \dots, H_n$, и расположенным в порядке возрастания их значений $h_{(1)} \leq h_{(2)} \leq \dots \leq h_{(n)}$. Статистические свойства порядковых статистик, как при конечных и малых объемах выборки, так и при больших объемах выборки (то есть в асимптотике), подробно изучены и описаны в литературе [3]. Обоснованием использования доверительных границ порядковых статистик является приведенное ниже Утверждение 1, доказательство которого следует из [4, с. 94].

Рассмотрим общий случай. Пусть $\{H_{(1)}, H_{(2)}, \dots, H_{(n)}\}$ — порядковые статистики для выборки $\{H_1, H_2, \dots, H_n\}$. Обозначим квантиль уровня p через $h_p = F^{-1}(p)$, $0 < p < 1$, где $F_H(h)$ — неизвестная функция распределения наблюдаемой случайной величины. Справедлива следующая теорема.

Утверждение 1. Пусть имеется два числа r и s такие что, $P(H_{(r)} < h_p < H_{(s)}) = 1 - 2\alpha$. Заданная доверительная вероятность и интервал $(H_{(r)}, H_{(s)})$ со случайными границами $H_{(r)}$ и $H_{(s)}$ включает неизвестный квантиль $h_p = F^{-1}(p)$, $0 < p < 1$. Тогда вероятность $P(H_{(r)} < h_p < H_{(s)})$ не зависит от неизвестной функции распределения $F_H(h)$.

Выберем в качестве порядковой статистики для выборки $(h_i^{i+\tau-1} = \{h_i, h_{i+1}, \dots, h_{i+\tau-1}\})$ выборочную медиану. Тогда в качестве интервальной оценки для $Me(h_i^{i+\tau-1})$ можно выбрать двумерную статистику вида (h_p, h_k) , $i \leq l < k \leq i + \tau - 1$, $i=1, \dots, N-\tau+1$, определяющую симметричный интервал с уровнем доверия $1 - 2\alpha$, полагая $k = \tau - l - 1 + i$.

Поскольку

$$P(h_l < Me(h_i^{i+\tau-1}) < h_k) = (1/2)^\tau \sum_{t=l}^{k-1} C_t^\tau = 1 - 2\alpha, \quad (2)$$

значение l , согласно теореме Муавра-Лапласа, можно рассчитать по формуле:

$$l = \left[0,5 \left\{ \tau + 1 - \sqrt{\tau} \Psi(1 - \alpha) \right\} + 1 \right] + i, \quad i=1, \dots, N - \tau + 1 \quad (3)$$

Заметим, что выборочная медиана вычисляется по формуле:

$$\text{med}(H_1, H_2, \dots, H_n) = \begin{cases} \frac{1}{2} \left(H_{(\frac{n}{2})} + H_{(\frac{n}{2}+1)} \right), & \text{если } n/2 \text{ — целое,} \\ H_{(\frac{n+1}{2})}, & \text{если } (n+1)/2 \text{ — целое,} \end{cases} \quad (4)$$

где $H_{(i)}$ — i -я порядковая статистика, равная i -му по величине значению выборочного ряда $h_1 \leq h_2 \leq \dots \leq h_n$, ранжированного по возрастанию.

Процедура сдвига временного ряда с шириной окна $1 < \tau < T$ может привести к проблеме вычисления робастной оценки медианы, поскольку оценки вычисляются по малым выборкам. В этом случае оценка медианы может быть нестабильной и не очень точной.

Предлагается строить доверительный интервал медианы выборок с помощью устойчивой оценки Ходжеса-Лемана по средним Уолша.

Порядковая статистика Ходжеса-Лемана по средним Уолша рассчитывается по формуле [2, с. 103]:

$$H_{H-L} = \text{med}[(H_{(i)} + H_{(j)}) / 2], \quad 1 \leq i \leq j \leq \tau. \quad (5)$$

В формуле (5) вычисляется медиана по формуле (4) из набора $n(n-1)/2$ средних Уолша $(H_{(i)} + H_{(j)})/2$, $1 \leq i \leq j \leq \tau$. Свойства медианы Ходжеса-Лемана H_{H-L} хорошо изучены и подробно описаны в литературе [2, 5, 6]. Следует отметить высокую устойчивость этой оценки к отклонениям от нормальности распределения и засоренности выборки.

Таким образом, применение оценки Ходжеса-Лемана приводит к вычислению выборочной медианы на выборках, объем которых превышает 30, если ширина окна $\tau \geq 9$.

Для решения задачи прогнозирования тенденции развития случайных процессов во времени предлагается следующий алгоритм.

1. Инициализация.

Получаем случайную последовательность $\{h_t | t \leq T\}$, используя формулу $h_t = \ln(X_t / X_{t-1})$, где X_t , $t = 1, \dots, T$ — уровень наблюдаемого временного ряда.

2. Итерация.

Пусть некоторое четное число $1 < \tau < T$ определяет ширину окна процедуры сдвига временного ряда h_k , $k = 1, \dots, T$. Случайные последовательности $(h)_i^{i+\tau-1} = \{h_i, h_{i+1}, \dots, h_{i+\tau-1}\}$, при сдвиге $\{h_k\}$ по $i = 1, \dots, T - \tau + 1$ на один шаг упорядочиваем по возрастанию. Для последовательности $(h)_i^{i+\tau-1}$ по формулам (2)–(5) строим доверительный интервал оценки Ходжеса-Лемана с заданным уровнем значимости α . Пороговые переменные θ_-^i и θ_+^i получают значение левой и правой границы доверительных интервалов соответственно.

Вычисляем показатели тренда по формуле (1).

Для вычисления ошибки прогноза предложенного метода для $i = 1, \dots, T - \tau + 1$ получаем фактические значения тренда динамики временного ряда X_t , $t = 1, \dots, T$ по следующим формулам:

$$\text{Trend}_i^{fk} = \begin{cases} -1, & X_i - X_{i-1} < -\sigma_i \\ 0, & (X_i - X_{i-1} \geq -\sigma_i) \& (X_i - X_{i-1} \leq \sigma_i) \\ 1, & X_i - X_{i-1} > \sigma_i, \end{cases} \quad (6)$$

где $\sigma_i = \sqrt{Me(\sigma^2)_i^{i+\tau-1}}$, $Me(\sigma^2)_i^{i+\tau-1}$ — медиана случайной последовательности

$$(\sigma^2)_i^{i+\tau-1} = \left\{ \left(X_i - Me(X)_i^{i+\tau-1} \right)^2, \dots, \left(X_{i+\tau-1} - Me(X)_i^{i+\tau-1} \right)^2 \right\}, \quad i = 1, \dots, T - \tau + 1.$$

3. Остановка.

Таким образом, после реализации описанного выше алгоритма получаем две последовательности $\{\text{Trend}_i\}$, $\{\text{Trend}_i^{fk}\}$ размерности $1, \dots, T - \tau + 1$, состоящие из элементов множества: $\{-1, 0, 1\}$.

Теперь можно построить матрицу ошибок, которая показывает, насколько хорошо алгоритм определяет тренд динамики уровней временного ряда. Матрица ошибок используется для оценки качества работы алгоритма.

		-1	1	0
Прогноз	-1	TP(-1,-1)	FN(-1,0)	FN(-1,1)
	0	FN(0,-1)	TP(0,0)	FN(0,1)
	1	FN(1,-1)	FN(1,0)	TP(1,1)

Здесь TP $(\hat{\xi}, \xi)$ — это количество прогнозов, которые верно определили оценку тенденции ξ , FN $(\hat{\xi}, \xi)$ — это количество прогнозов, которые неверно определили направление динамики временного ряда.

Качество полученных прогнозов можно определить отношением:

$$\text{accuracy} = \sum_{\xi=-1}^1 TP(\hat{\xi}, \xi) / (T - \tau + 1). \quad (7)$$

Также можно рассчитать метрики качества предложенного метода для каждого из значений функции $\{\text{Trend}_i^{fk}\}$. Например, точность для прогнозирования падений и роста можно вычислить по формулам:

$$\text{accuracy}(1) = TP(1,1) / (TP(1,1) + FN(1,0) + FN(1,-1)). \quad (8)$$

$$\text{accuracy}(-1) = TP(-1,-1) / (TP(-1,-1) + FN(-1,0) + FN(-1,1)). \quad (9)$$

Средняя абсолютная ошибка (MAE, Mean Absolute Error) прогноза также может быть показателем качества предложенного метода получения одношаговых прогнозов тенденции развития временного ряда.

$$\text{MAE} = \frac{1}{T - \tau + 1} \sum_{i=1}^{T-\tau+1} |\text{Trend}_i - \text{Trend}_i^{fk}|. \quad (10)$$

Результаты исследования. Для анализа и апробации описанного метода был выбран логарифм изменения спотовой цены на нефть марки Urals. Для исследования были взяты цены закрытия торгов на Московской фондовой бирже за период с 12.07.2018 г. по 23.02.2022 г. Объем выборки составил 946 значений. Вычислительный эксперимент проводился с помощью среды статистического программирования *R* и средств прогнозирования и анализа данных MS Excel.

Пропуски данных в те дни, когда торги не ведутся (праздники и выходные), были восстановлены при соблюдении следующих правил:

- если был пропущен один день, то ему присваивается показатель закрытия торгов предыдущего дня;
- если пропущено два дня, то первый день восстанавливается согласно предыдущему пункту, второй согласно значению следующего дня;
- если пропущено три дня, первым двум дням присваивается значение предыдущего, а третий день восстанавливается по значению закрытия торгов следующего дня;
- если пропущено 4 дня, первые два дня заполняются значением за предыдущий день, третий и четвертый – значением за следующий день;
- если пропущено более 4 дней (в данном исследовании нет таких длинных пропусков) данные восстанавливались бы с помощью линейной (или нелинейной) регрессии от времени.

Получившийся ряд содержит 1323 значения. График временного ряда представлен на рис. 1:

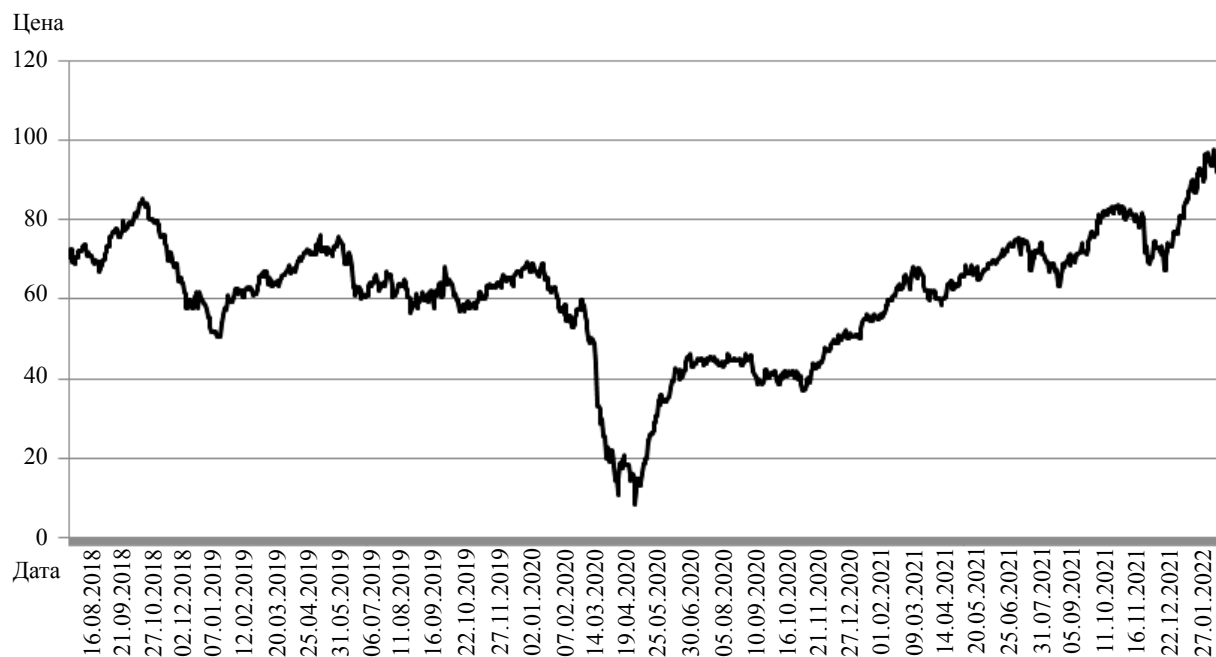


Рис. 1. Динамика спотовой цены на нефть марки Urals с 12.07.2018 г. по 23.02.2022 г.

Логарифм изменения спотовой цены на нефть марки Urals представлен на рис. 2.

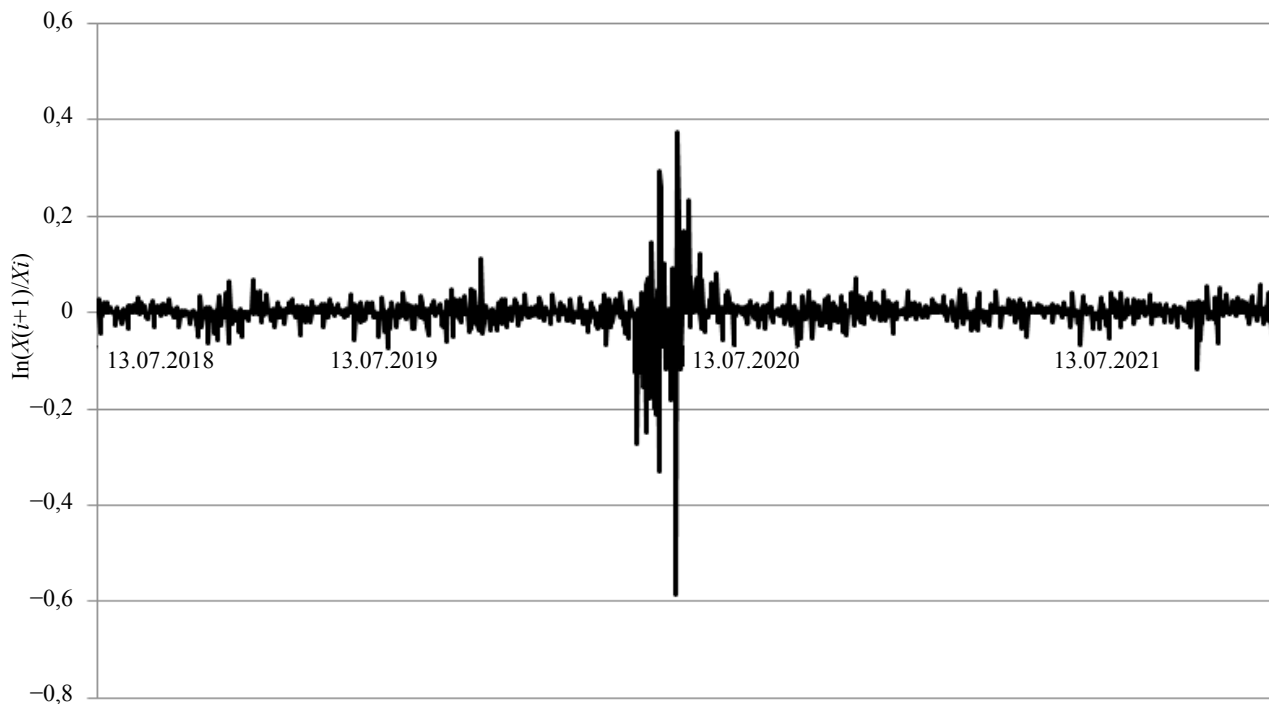


Рис. 2. Логарифм изменения спотовой цены на нефть марки Urals с 13.07.2018 по 23.02.2022

Чтобы получить одношаговый прогноз тенденции развития временного ряда, выделим временной период с 23.05.2020 г. по 23.02.2022 г., соответствующий стационарному случайному процессу $h_k, k=1, \dots, 643$.

Реализация алгоритма возможна при различных значениях $\tau \geq 9$.

На рис. 3 показан график зависимости ошибки MAE от ширины окна.

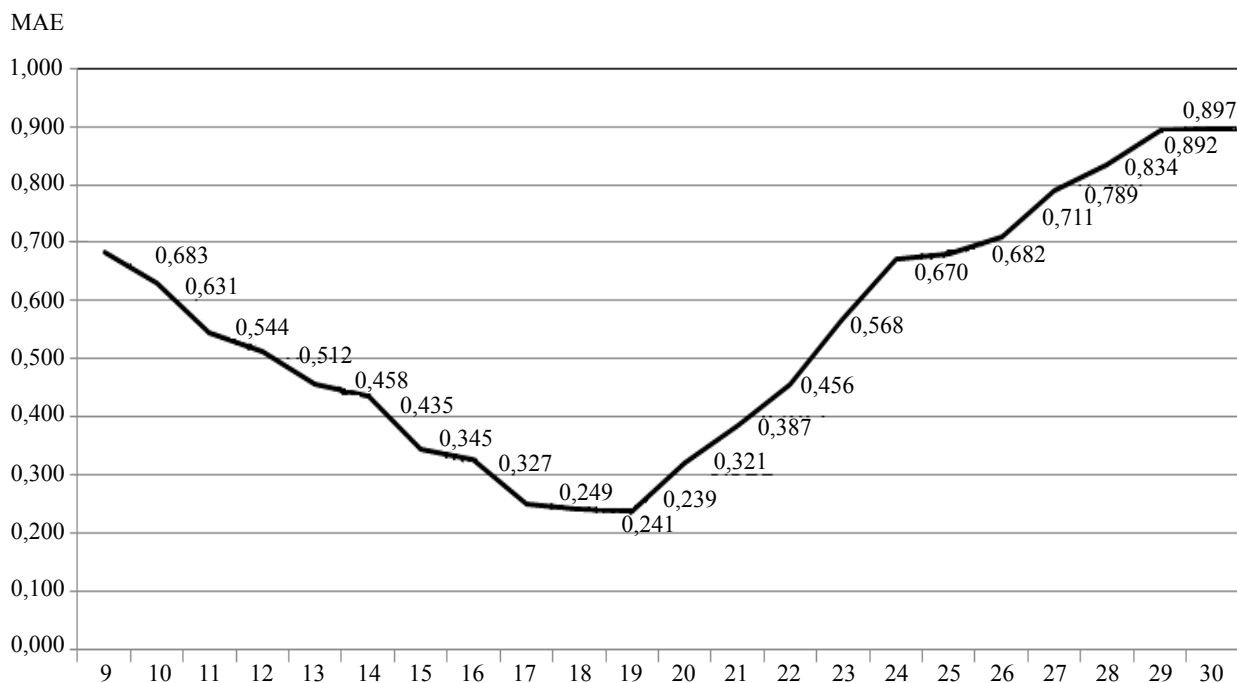


Рис. 3. График зависимости средней абсолютной ошибки прогноза от ширины окна

Матрица ошибок для $\tau = 9$ выглядит следующим образом.

		-1	0	1
Прогноз	-1	71	35	46
	0	50	97	56
	1	70	60	149

Тогда нетрудно вычислить точность построенного прогноза $\text{ассигассу} = 317/634=0,5$ и точность для прогнозов различных направлений динамики цены нефти: $\text{ассигассу}(-1)=71/152=0,467$, $\text{ассигассу}(0)=97/203=0,478$, $\text{ассигассу}(1)=149/279=0,53$. Самая высокая точность алгоритма для выбранного набора данных соответствует прогнозу роста цены нефти, хотя существенной разницы для падения и сохранения тенденции не наблюдается.

Обсуждение и заключения. Из результатов вычислительного эксперимента видно, что параметры предложенного метода могут быть настроены так, чтобы получать достоверные одношаговые прогнозы направления развития временных рядов. С прохождением ширины окна некоторого порогового значения ошибка прогноза начинает расти. Основная вычислительная сложность алгоритма заключалась как в получении непосредственных оценок Хорджеса-Лемана, так и определения границ доверительных интервалов. Предложенный в статье метод прогноза основанный на устойчивых порядковых статистиках показал свою эффективность на экспериментальных данных и может быть использован как самостоятельный метод построения одношаговых прогнозов. Дальнейшее развитие предложенного метода предполагает усовершенствования вычислительных процедур, верификацию метода в случае наличия в случайной последовательности выбросов и скачков.

Список литературы

1. Дейвид, Г. Порядковые статистики / Г. Дейвид. — Москва : Наука. Главная редакция физико-математической литературы, 1979. — 336 с.
2. Кобзарь, А. И. Прикладная математическая статистика. Для инженеров и научных работников / А. И. Кобзарь. — Москва : ФИЗМАТЛИТ, 2006. — 816 с.
3. Сархан, А. Е. Введение в теорию порядковых статистик / А. Е. Сархан, В. Гринберг / пер. с англ. под ред. Ф.Я. Боярского. — Москва : Статистика, 1970 г. — 414 с.
4. Мисюра, В. В. Прогнозирование тенденций развития случайных процессов с помощью порядковой статистики/ В. В. Мисюра // Инженерный журнал Дона. — 2018, № 4(51). — с. 1155.
7. Шуленин, В. П. Математическая статистика: Непараметрическая статистика / В. П. Шуленин / Ч. 2. — Томск : Изд-во НТЛ, 2012 г.
6. Hodges, J. L. Estimation of location based on rank tests / J. L. Hodges, E. L. Lehmann // The Annals of Mathematical Statistics. — 1963. — No. 4. — P. 598–611.

Поступила в редакцию 14.02.2023.

Поступила после рецензирования 07.03.2023.

Принята к публикации 09.03.2023.

Об авторах:

Мисюра Валентина Владимировна, кандидат физико-математических наук, доцент, кафедра математики и информатики, Донской государственный технический университет (РФ, 344003, Ростов-на-Дону, пл. Гагарина, 1), [ORCID](https://orcid.org/0000-0001-9151-2011), vvmisyura2011@gmail.com

Мисюра Елена Владимировна, Российский экономический университет им. Плеханова, Институт цифровой экономики и информационных технологий (Российская Федерация, 117997, г. Москва, Стремянный переулок, 36), [ORCID](https://orcid.org/0000-0001-9151-2011), misurahelen@gmail.com

Конфликт интересов:

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Все авторы прочитали и одобрили окончательный вариант рукописи.