

Computational Mathematics and Information Technologies

Вычислительная
математика /
Computational
Mathematics

Математическое
моделирование /
Mathematical Modelling

Информационные
технологии /
Information Technologies





Computational Mathematics and Information Technologies

Рецензируемый научно-теоретический журнал (издаётся с 2017 года)

eISSN 2587-8999

DOI: 10.23947/2587-8999

Том 8, № 3, 2024

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

<i>Индексация</i>	РИНЦ, CrossRef, CyberLeninka
<i>Наименование органа, зарегистрировавшего издание</i>	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
<i>Учредитель и издатель</i>	Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Донской государственный технический университет» (ДГТУ)
<i>Периодичность</i>	4 выпуска в год
<i>Адрес учредителя и издателя</i>	344003, Российская Федерация, г. Ростов-на-Дону, пл. Гагарина, 1
<i>E-mail</i>	CMIT-EJ@yandex.ru
<i>Телефон</i>	+7(863) 273–85–14
<i>Сайт</i>	https://cmit-journal.ru
<i>Дата выхода в свет</i>	30.09.2024



Computational Mathematics and Information Technologies

Peer-reviewed scientific and theoretical journal (published since 2017)

eISSN 2587-8999

DOI: 10.23947/2587-8999

Vol. 8, no. 3, 2024

The scope of “Computational Mathematics and Information Technologies” is focused on fundamental and applied research according to the following scientific sections:

1. Computational Mathematics
2. Mathematical Modelling
3. Information Technologies

<i>Indexing</i>	RSCI, Crossref, Cyberleninka
<i>Name of the body that registered the publication</i>	Mass media registration certificate ЭЛ № ФС 77-66529 dated July 21, 2016 issued by the Federal Service for Supervision of Communications, Information Technology and Mass Media
<i>Founder and publisher</i>	Federal State Budgetary Educational Institution of Higher Education Don State Technical University (DSTU)
<i>Periodicity</i>	4 issues per year
<i>Address of the founder and publisher</i>	1, Gagarin sq., Rostov-on-Don, 344003, Russian Federation
<i>E-mail</i>	CMIT-EJ@yandex.ru
<i>Telephone</i>	+7(863) 273–85–14
<i>Website</i>	https://cmit-journal.ru
<i>Date of publication</i>	30.09.2024

Редакционная коллегия

Главный редактор, Сухинов Александр Иванович, член-корреспондент РАН, доктор физико-математических наук, профессор, Донской государственный технический университет (Ростов-на-Дону, Российская Федерация), [MathSciNet](#), [РИНЦ](#), [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, Российская Федерация), [РИНЦ](#), [ORCID](#)

Ответственный секретарь, Петров Александр Пхоун Чжо, доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник, Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН (Москва, Российская Федерация), [РИНЦ](#), [ИСТИНА](#), [ORCID](#), [ResearcherID](#), [Scopus](#)

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

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

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

Лазарева Галина Геннадьевна, член-корреспондент РАН, доктор физико-математических наук, профессор РАН, Российский университет дружбы народов (Москва, Российская Федерация)

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

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

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

Тишкин Владимир Федорович, член-корреспондент РАН, доктор физико-математических наук, профессор, Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН (Москва, Российская Федерация)

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

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

Editorial Board

Editor-in-Chief, Alexander I. Sukhinov, Corresponding member of RAS, Dr.Sci. (Phys.-Math.), Professor, Don State Technical University (Rostov-on-Don, Russian Federation), [MathSciNet](#), [RSCI](#), [ORCID](#), [ResearcherID](#), [Scopus](#), sukhinov@gmail.com, spu-40.4@donstu.ru

Deputy Chief Editor, Mikhail V. Yakobovskii, Corresponding Member of RAS, Dr.Sci. (Phys.-Math.), Professor, Keldysh Institute of Applied Mathematics, Russian Academy of Sciences (Moscow, Russian Federation), [RSCI](#), [ORCID](#)

Executive Secretary, Alexander P. Petrov Dr.Sci. (Phys.-Math.), Head Scientist Researcher, Keldysh Institute of Applied Mathematics, Russian Academy of Sciences (Moscow, Russian Federation), [RSCI](#), [Istina](#), [ORCID](#), [ResearcherID](#), [Scopus](#)

Vladimir V. Voevodin, Corresponding Member of RAS, Dr.Sci. (Phys.-Math.), Professor, Lomonosov Moscow State University (Moscow, Russian Federation)

Vladimir A. Gasilov, Dr.Sci. (Phys.-Math.), Professor, Keldysh Institute of Applied Mathematics, Russian Academy of Sciences (Moscow, Russian Federation)

Valentin A. Gushchin, Corresponding Member of RAS, Dr.Sci. (Phys.-Math.), Professor, Institute of Computer Aided Design, Russian Academy of Sciences (Moscow, Russian Federation)

Galina G. Lazareva, Corresponding member of RAS, Dr. Sci. (Phys.-Math), Professor of RAS, RUDN University, (Moscow, Russian Federation)

Vladimir I. Marchuk, Dr.Sci. (Eng.), Professor, Don State Technical University (Rostov-on-Don, Russian Federation)

Igor B. Petrov, Corresponding Member of RAS, Dr.Sci. (Phys.-Math.), Professor, Moscow Institute of Physics and Technology (State University) (Moscow, Russian Federation)

Sergey V. Polyakov, Dr.Sci. (Phys.-Math.), Professor, Keldysh Institute of Applied Mathematics, Russian Academy of Sciences (Moscow, Russian Federation)

Vladimir F. Tishkin, Corresponding Member of RAS, Dr.Sci. (Phys.-Math.), Professor, Keldysh Institute of Applied Mathematics, Russian Academy of Sciences (Moscow, Russian Federation)

Boris N. Chetverushkin, Academician of RAS, Dr.Sci. (Phys.-Math.), Professor, Keldysh Institute of Applied Mathematics, Russian Academy of Sciences (Moscow, Russian Federation)

Alexander E. Chistyakov, Dr.Sci. (Phys.-Math.), Professor, Don State Technical University (Rostov-on-Don, Russian Federation)

Содержание

ЮБИЛЕЙ УЧЕНОГО

Поздравление с юбилеем члена-корреспондента РАН А.И. Сухинова 7

ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

Математическое моделирование пространственно-неоднородного нестационарного взаимодействия вредителей с трансгенной и немодифицированной агрокультурами с учетом таксиса 9
А.И. Сухинов, И.А. Бугаева

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Модифицированный метод Бубнова-Галеркина для решения краевых задач с линейным обыкновенным дифференциальным уравнением 23
Н.К. Волосова, К.А. Волосов, А.К. Волосова, Д.Ф. Пастухов, Ю.Ф. Пастухов

Математическое моделирование воздействия ИК-лазерного излучения на встречный поток наночастиц с метаном 34
Е.Е. Пескова, В.Н. Снытников

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ МАТЕМАТИКА

Построение разностных схем второго порядка точности для задач диффузии-конвекции мультифракционных взвесей в прибрежных морских системах 43
В.В. Сидорякина

Contents

ANNIVERSARY OF THE SCIENTIST

- Congratulations to Corresponding Member of RAS
Alexander Ivanovich Sukhinov** 7

INFORMATION TECHNOLOGIES

- Mathematical Modelling of Spatially Inhomogeneous Non-Stationary
Interaction of Pests with Transgenic and Non-Modified Crops
Considering Taxis** 9
A.I. Sukhinov, I.A. Bugaeva

MATHEMATICAL MODELLING

- A Modified Bubnov-Galerkin Method for Solving Boundary Value Problems
with Linear Ordinary Differential Equations** 23
N.K. Volosova, K.A. Volosov, A.K. Volosova, D.F. Pastukhov, Yu.F. Pastukhov
- Mathematical Modelling of the Impact of IR Laser Radiation
on an Oncoming Flow of Nanoparticles with Methane** 34
E.E. Peskova, V.N. Snytnikov

COMPUTATIONAL MATHEMATICS

- Construction of Second-Order Finite Difference Schemes
for Diffusion-Convection Problems of Multifractional Suspensions
in Coastal Marine Systems** 43
V.V. Sidoryakina

ЮБИЛЕЙ УЧЕНОГО ANNIVERSARY OF THE SCIENTIST

К юбилею члена-корреспондента РАН, доктора физико-математических наук, профессора СУХИНОВА АЛЕКСАНДРА ИВАНОВИЧА

Сухинов Александр Иванович — заведующий кафедрой математики и информатики Донского государственного технического университета, директор НИИ Математического моделирования и прогнозирования сложных систем, доктор физико-математических наук, профессор, член-корреспондент РАН, заслуженный деятель науки РФ.

А.И. Сухиновым разработаны и исследованы масштабируемые параллельные методы решения сеточных уравнений диффузии-конвекции-реакции, в том числе метод минимальных поправок и адаптивный попеременно-треугольный метод для задач с несамосопряженным оператором, имеющие наилучшую скорость сходимости при ограничении на сеточное число Пекле. Построены и исследованы экономичные в целом (с учетом обменов) параллельные алгоритмы решения задач диффузии-конвекции-реакции и гидрофизики, базирующиеся на схемах расщепления и масштабируемых методах решения сеточных уравнений, учитывающие архитектуру перспективных вычислительных систем с массовым параллелизмом.

А.И. Сухиновым создан, исследован и программно реализован на суперЭВМ с распределенной памятью комплекс взаимосвязанных 3D прецизионных моделей гидродинамики, транспорта тепла, солей, взвесей и биогеохимических циклов для прибрежных систем, воспроизводящих точно вертикальный массообмен, устойчивых при перепадах глубин в 40–50 раз, на основе которых обнаружены вихревые структуры (Азовское и Средиземное моря), зоны гипоксии и анаэробного заражения, а также с высокой точностью осуществлен прогноз экстремальных штормовых нагонов.

А.И. Сухиновым построена корректная линеаризация начально-краевой задачи для квазилинейного уравнения параболического типа, описывающего задачи транспорта наносов в прибрежных системах и доказана сходимость решения цепочки линеаризованных задач к решению исходной нелинейной задачи, исследована «близость» решений начально-краевых задач для моделей динамики биогеохимических циклов, описываемых 10 уравнениями диффузии-конвекции, с нелинейными и линеаризованными функциями источников.

А.И. Сухиновым реализована монотонная разностная схема, аппроксимирующая начально-краевую задачу для модели динамики биогеохимических циклов, описываемой 10 нестационарными пространственно-трехмерными уравнениями диффузии-конвекции, с нелинейными функциями источников. Полученная дискретная модель биогеохимических циклов применена к реальной прибрежной экосистеме — Азовскому морю; результаты моделирования с использованием реальных данных продемонстрировали возможности валидного предсказания географической динамики распределения фитопланктонных популяций при изменяющихся погодноклиматических условиях — продолжающемся осолонении моря и сокращении пресноводного стока.

Для параллельного численного решения задач гидрофизики морских и прибрежных систем А.И. Сухиновым построены явные параллельные алгоритмы решения на основе введения (регуляризации по Б.Н. Четверушкину) разностных производных второго порядка в дискретные модели с корректным определением допустимых значений множителя-регуляризатора, позволившие в 50–70 раз уменьшить время параллельного решения задач гидрофизики по сравнению с другими известными дискретными моделями, в том числе при предсказании штормовых нагонов и последствий природных и техногенных катастроф.

А.И. Сухинов участвовал в проведении 17 экспедиций в Азовском море, Средиземном море и т. д. В 2001 году при его участии в Азовском море была обнаружена обширная зона сероводородного заражения. На основе построенных моделей удалось объяснить механизм возникновения этой катастрофы и открыть существование крупномасштабных замкнутых течений в восточной части Азовского моря, которые играют роль гигантских природных ловушек загрязняющих веществ и планктонных популяций — S структур.

По инициативе А.И. Сухинова и под его руководством в 2015–2023 гг. выполнены крупные проекты по Федеральной целевой программе «Исследования и разработки в интересах развития научно-технологического комплекса России на 2014–2020 гг.», Российского научного фонда, РФФИ и др., общим объемом более 280 млн руб.

Сухинов А.И. проводит значительную научно-организационную работу. В 2019 году избран членом-корреспондентом РАН по Отделению Математических наук. Он является экспертом РФФИ, РНФ, РАН, дирекции

НТП Минобрнауки России. Председатель диссертационного совета 24.2.297.10 на базе ДГТУ по специальности 1.2.2 «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ», а также является членом диссертационных советов на базе Южного федерального и Северо-Кавказского федерального университетов, состоит в редколлегиях 3-х журналов ВАК и журнала, индексируемого в наукометрической базе Scopus, а также является членом программных комитетов 3 авторитетных международных и всероссийских конференций.

Результаты научных исследований и опытно-конструкторских разработок А.И. Сухинова внедрены на предприятиях России и Ростовской области (Донэнергомаш, Донские технологии и др.), опубликованы более чем в 430 трудах, в числе которых 5 монографий, 10 учебных пособий, 14 патентов и авторских свидетельств. В 2019–2023 гг. им опубликовано более 100 научных работ, в том числе более 60 индексируемых в наукометрических базах Scopus и Web of Sciences.

А.И. Сухинов вносит значительный вклад в развитие и совершенствование образовательного процесса и подготовку инженерных и научно-педагогических кадров. Созданные под его руководством прецизионные математические модели и суперкомпьютерные программные комплексы реализованы в образовательном процессе. Им подготовлено 4 доктора наук, 33 кандидата наук. Ученики А.И. Сухинова выиграли в 2015–2022 гг. 7 грантов РФФИ и РФФИ, а также грант Президента Российской Федерации для молодых ученых.

Коллектив редколлегии журнала «Computational Mathematics and Information Technologies», коллеги Александра Ивановича поздравляют глубокоуважаемого юбиляра, желают ему крепкого здоровья, новых научных открытий и радости от результатов своих трудов! Пусть впереди будет ещё много успешных проектов и благодарных учеников!

Редакционная коллегия журнала

Computational Mathematics and Information Technologies

Ответственный секретарь — Петров Александр Пхоун Чжо,

Василевский Юрий Викторович,

Воеводин Владимир Валентинович,

Гасилов Владимир Анатольевич,

Гущин Валентин Анатольевич,

Лазарева Галина Геннадьевна,

Марчук Владимир Иванович,

Петров Игорь Борисович,

Поляков Сергей Владимирович,

Тишкин Владимир Федорович,

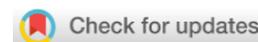
Четверушкин Борис Николаевич,

Чистяков Александр Евгеньевич,

Якобовский Михаил Владимирович.

ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

INFORMATION TECHNOLOGIES



УДК 51–76, 519.6

Оригинальное эмпирическое исследование

<https://doi.org/10.23947/2587-8999-2024-8-3-9-22>


Математическое моделирование пространственно-неоднородного нестационарного взаимодействия вредителей с трансгенной и немодифицированной агрокультурами с учетом таксиса

А.И. Сухинов¹  , И.А. Бугаева² ¹ Донской государственный технический университет, г. Ростов-на-Дону, Российская Федерация² Южный федеральный университет, г. Ростов-на-Дону, Российская Федерация✉ sukhinov@gmail.com

Аннотация

Введение. Рассматривается объединенная пространственно-неоднородная нестационарная модель взаимодействия генетически модифицированного растительного ресурса (кукурузы) при наличии на поле вредителя — кукурузного мотылька, также локализованного на относительно небольшом участке поля немодифицированной кукурузы. Предполагается, что на обе растительные культуры воздействуют насекомые-вредители, способные к самостоятельному перемещению (таксису) в направлении градиента растительного ресурса. Также рассматриваемая модель учитывает диффузионные процессы в динамике всех компонентов объединенной модели, рост биомассы, генетические особенности обоих видов растительного ресурса и процессов выедания агрокультур, явления роста и деградации, диффузии и мутации вредителей и дает возможность, на основе прогностических расчетов, с одной стороны, уменьшить потери урожая, с другой стороны — повысить стойкость трансгенной агрокультуры к воздействию вредителя за счет снижения скорости его естественной мутации.

Материалы и методы. Математическая модель представляет собой развитие модели Костицына и является начально-краевой задачей для нелинейной системы уравнений конвекции-диффузии, которые описывают пространственно-временную динамику изменения плотности биомассы двух типов агрокультуры — трансгенной и немодифицированной, а также удельные численности (плотности) образовавшихся в результате мутаций трех генотипов вредителей (кукурузного мотылька).

Авторами выполнена линеаризация уравнений диффузии-конвекции по правым частям на временной сетке — нелинейные члены, входящие в каждое из уравнений, берутся с запаздыванием на предыдущем временном слое. Члены, определяющие таксис, представлены в так называемой симметричной форме, гарантирующей кососимметричность соответствующего непрерывного оператора, а при аппроксимации на пространственной сетке — и разностного оператора.

Результаты исследования. Построена устойчивая монотонная разностная схема, аппроксимирующая исходную задачу со вторым порядком на пространственной равномерной 2D сетке. Приведены результаты численного решения модельных задач, качественно согласующиеся с реально наблюдаемыми процессами. Получены решения для различных соотношений модифицированного и немодифицированного участков поля.

Обсуждение и заключение. Полученные результаты учета поведения вредителей в зависимости от типа таксиса могут позволить существенно увеличить время приобретения Bt -устойчивости. При этом динамика концентрации вредителей, перемещающихся в направлении градиента поиска пищи, значительно отличается от концентрации вредителей, перемещающихся в направлении партнёра для размножения.

Ключевые слова: математическое моделирование, генетически модифицированная кукуруза, агрокультура, быстрый и медленный таксис

Для цитирования. Сухинов А.И., Бугаева И.А. Математическое моделирование пространственно-неоднородного нестационарного взаимодействия вредителей с трансгенной и немодифицированной агрокультурами с учетом таксиса. *Computational Mathematics and Information Technologies*. 2024;8(3):9–22. <https://doi.org/10.23947/2587-8999-2024-8-3-9-22>

Mathematical Modelling of Spatially Inhomogeneous Non-Stationary Interaction of Pests with Transgenic and Non-Modified Crops Considering Taxis

Alexander I. Sukhinov¹  , Irina A. Bugaeva² 

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

² Southern Federal University, Rostov-on-Don, Russian Federation

 sukhinov@gmail.com

Abstract

Introduction. This paper addresses a unified spatially inhomogeneous, non-stationary model of interaction between genetically modified crop resources (corn) and the corn borer pest, which is also present on a relatively small section of non-modified corn. The model assumes that insect pests influence both types of crops and are capable of independent movement (taxis) towards the gradient of plant resources. It also considers diffusion processes in the dynamics of all components of the unified model, biomass growth, genetic characteristics of both types of plant resources, processes of crop consumption, phenomena of growth and degradation, diffusion, and mutation of pests. The model allows for predictive calculations aimed at reducing crop losses and increasing the resistance of transgenic crops to pests by slowing down the natural mutation rate of the pest.

Materials and Methods. The mathematical model is an extension of Kostitsin's model and is formulated as an initial-boundary value problem for a nonlinear system of convection-diffusion equations. These equations describe the spatiotemporal dynamics of biomass density changes in two types of crops — transgenic and non-modified — as well as the specific populations (densities) of three genotypes of pests (the corn borer) resulting from mutations. The authors linearized the convection-diffusion equations by applying a time-lag method on the time grid, with nonlinear terms from each equation taken from the previous time layer. The terms describing taxis are presented in a symmetric form, ensuring the skew-symmetry of the corresponding continuous operator and, in the case of spatial grid approximation, the finite-difference operator.

Results. A stable monotonic finite-difference scheme is developed, approximating the original problem with second-order accuracy on a uniform 2D spatial grid. Numerical solutions of model problems are provided, qualitatively corresponding to observed processes. Solutions are obtained for various ratios of modified and non-modified sections of the field.

Discussion and Conclusion. The obtained results regarding pest behavior, depending on the type of taxis, could significantly extend the time for pests to acquire *Bt* resistance. The concentration dynamics of pests moving in the direction of the food gradient differs markedly from the concentration of pests moving towards a mate for reproduction.

Keywords: mathematical modeling, genetically modified corn, crops, fast and slow taxis

For citation. Sukhinov A.I., Bugaeva I.A. Mathematical Modelling of Spatially Inhomogeneous Non-Stationary Interaction of Pests with Transgenic and Non-Modified Crops Considering Taxis. *Computational Mathematics and Information Technologies*. 2024;8(3):9–22. <https://doi.org/10.23947/2587-8999-2024-8-3-9-22>

Введение. Рассматривается объединенная пространственно-неоднородная нестационарная модель взаимодействия генетически модифицированного растительного ресурса (кукурузы) [1–5] при наличии на поле вредителя — кукурузного мотылька, также локализованного на относительно небольшом участке поля немодифицированной кукурузы. Предполагается, что на обе растительные культуры воздействуют насекомые-вредители, способные к самостоятельному перемещению в направлении градиента растительного ресурса, то есть учитывается явление таксиса [6, 7]. Кроме того, рассматриваемая модель учитывает диффузионные процессы в динамике всех компонент объединенной модели. Расположение на одном земельном участке (поле) двух агрокультур одного вида — трансгенной и немодифицированной, занимающей существенно меньшую по сравнению с первой площадь, позволяет локализовать большую часть вредителей на участке меньшей площади [8–13]. При выборе относительной доли этого участка с учетом плодородия, роста биомассы, диффузии, генетических особенностей обоих видов растительного ресурса и процессов выедания агрокультур, а также явлений роста и деградации, таксиса, диффузии, мутации вредителей, появляется возможность на основе прогностических расчетов по построенной модели уменьшить потери урожая и повысить стойкость трансгенной агрокультуры к воздействию вредителя за счет снижения скорости его естественной мутации.

Материалы и методы. Математическая модель представляет собой начально-краевую задачу для нелинейных уравнений конвекции-диффузии с нелинейными функциями правых частей [14–17], которые описывают пространственно-временную динамику изменения плотности биомассы двух типов агрокультуры — трансгенной и немодифицированной, а также плотности образовавшихся в результате мутаций трех генотипов вредителя — кукурузного мотылька.

Трансгенные линии кукурузы, устойчивые к вредителю, продуцирующие кристаллы токсина «*Cry 3 Bt*», вырабатываются бактерией *Bacillus thuringiensis var. Tenebrionis*. Предполагается, что ген, отвечающий за наличие признака *Bt*-устойчивости у отдельной особи вредителя, может находиться в двух состояниях, называемых

аллелями: в состоянии *Bt*-восприимчивости (*s*-аллель) или *Bt*-устойчивости (*r*-аллель) [15–17]. Эти две аллели формируют три генотипа вредителя: *Bt*-восприимчивые генотипы *ss* и *rs* (если ген *Bt*-устойчивости рецессивный) и *Bt*-устойчивый генотип *rr*. Предлагаемый подход базируется на модифицированной демо-генетической модели Костицына [1, 15–21], дающей описание динамики конкурирующих генотипов вредителя на основе уравнений Лотки-Вольтерра [2, 3].

В работе выполнена линеаризация уравнений диффузии-конвекции на временной сетке — нелинейные члены [22, 23], входящие в каждое из уравнений, берутся с запаздыванием на предыдущем временном слое. Члены, определяющие таксис, аналогичны членам адвективного переноса и представлены в так называемой симметричной форме, гарантирующей кососимметричность соответствующего непрерывного оператора, а при аппроксимации на пространственной сетке — и разностного оператора. Такой подход при нежестких ограничениях на шаг по времени при аппроксимации на пространственной 2D сетке позволяет построить устойчивую монотонную разностную схему.

Постановка начально-краевой задачи. Пусть $R = R(x, y, t)$ — прирост биомассы исследуемой агрокультуры; r_R — мальтузианский коэффициент прироста. Известное уравнение динамики плотности биомассы имеет вид:

$$\frac{\partial R}{\partial t} = \delta_R \Delta R + r_R R \left(1 - \frac{R}{K_R}\right) - aRN, \quad (1)$$

$$r_R = r_r + g(x, y, t).$$

Здесь $g(x, y, t)$ — функция, учитывающая плодородие конкретного участка.

Предполагается наличие двух видов растительных ресурсов — «обычного» и трансгенного:

$$R = R_1 + R_2, \quad (2)$$

где $R_1 = \alpha(x, y)R$ — начальная биомасса растительного ресурса обычного вида; $R_2 = (1 - \alpha(x, y))R$ — начальная биомасса растительного ресурса трансгенного вида; $N = N_{ss} + N_{rs} + N_{rr}$ — общая плотность популяции вредителей; $N_{ij} = N_{ij}(x, y, t)$ — плотность генотипа ij в точке $(x, y) \in \Omega$ в момент времени t ($i, j = r$ или s); N_{ss} , N_{rs} , N_{rr} — плотности соответствующих генотипов вредителя; K_R — «емкость среды»; δ_R — коэффициент диффузии растительного ресурса; $\alpha(x, y)$ — коэффициент конкуренции между двумя видами растительного ресурса (при расстояниях между участками более 5 метров этим коэффициентом можно пренебречь).

Для каждого из генотипов вредителей далее в обозначениях, где это необходимо, используются индексы: *ss* и *rs* для *Bt*-восприимчивых генотипов и *rr* для *Bt*-устойчивого генотипа.

Напомним, что задача применения трансгенных агрокультур для подавления численности популяции насекомых-вредителей на полях заключается в необходимости снижения риска адаптации данного вредителя к *Bt*-токсину [8–13, 15, 16], вырабатываемому трансгенной культурой, при заданных ограничениях на пространственную конфигурацию системы и заданных сценариях стратегии «высокая доза — убежище», рекомендуемой для контроля развития устойчивости вредителя к *Bt*-растениям. «Высокая доза» означает, что уровень токсичности *Bt*-растений достаточно высок для уничтожения почти всех личинок вредителя. Незначительный процент выживших (*Bt*-устойчивых) особей должен подавляться за счет выделения на трансгенных полях или вблизи них специальных участков, не модифицированных растений (убежищ), являющихся источником *Bt*-восприимчивых особей, которые, спариваясь с *Bt*-устойчивыми, должны уменьшить процент потомства последних.

Прирост биомассы для обоих видов растений с учетом диффузии осуществляется по формулам:

$$\begin{cases} \frac{\partial R_1}{\partial t} = \delta_R \Delta R_1 + r_R R_1 \left(1 - \frac{R}{K_R}\right) - aR_1 N, \\ \frac{\partial R_2}{\partial t} = \delta_R \Delta R_2 + r_R R_2 \left(1 - \frac{R}{K_R}\right) - aR_2 N_{rr}. \end{cases} \quad (3)$$

Введем функции, описывающие распределение потомства f_{ij} , где индексы i, j принимают значения генотипов *ss*, *rs*, *ss*:

$$f_{ij} : \begin{cases} f_{ss}(N_{ss}, N_{sr}, N_{rr}) = W_{ss} \frac{1}{N} \left(N_{ss} + \frac{N_{rs}}{2}\right)^2, \\ f_{sr}(N_{ss}, N_{sr}, N_{rr}) = W_{rs} \frac{2}{N} \left(N_{ss} + \frac{N_{rs}}{2}\right) \left(\frac{N_{rs}}{2} + N_{rr}\right), \\ f_{rr}(N_{ss}, N_{rs}, N_{rr}) = W_{rr} \frac{1}{N} \left(\frac{N_{rs}}{2} + N_{rr}\right)^2. \end{cases} \quad (4)$$

Основная управляющая *Bt*-устойчивостью стратегия «высокая доза — убежище» моделируется следующим образом. Полагается, что ареал вредителя Ω может состоять из произвольного числа участков, засеянных либо *Bt*-кукурузой (Ω_{Bt}), либо обыкновенной кукурузой (Ω_{ref}). Введём $\sigma \in (0, 1)$ — коэффициент отбора по признаку *Bt*-устойчивости. Тогда приспособленности генотипов вредителя имеют вид:

$$\begin{aligned}
 W_{rr} &= 1 - c, \text{ на всем } \Omega; \\
 W_{rs}(\mathbf{x}) &= \begin{cases} 1 - h_c c, & \mathbf{x} \in \Omega_{ref}; \\ 1 - \sigma + h_\sigma (\sigma - c), & \mathbf{x} \in \Omega_{Bt}; \end{cases} \\
 W_{ss}(\mathbf{x}) &= \begin{cases} 1, & \mathbf{x} \in \Omega_{ref}; \\ 1 - \sigma, & \mathbf{x} \in \Omega_{Bt}, \end{cases}
 \end{aligned} \tag{5}$$

где c — цена, которую платит генотип, имеющий ген Bt -устойчивости, за преимущество, проявляющееся на Bt -полях; h_σ — уровень доминантности отбора по признаку устойчивости к Bt -токсину; h_c — уровень доминантности цены c , параметры $\sigma, c, h_\sigma, h_c \in [0, 1]$.

Пусть a — коэффициент поисковой активности мотылька; характеризующий его чувствительность к неоднородности распределения кукурузы; b — коэффициент плодовитости; μ — коэффициент смертности генотипов и α — коэффициент конкуренции между ними; $W_{ij} \in [0, 1]$ — коэффициент приспособленности генотипа ij к среде, определяющий его выживаемость в зависимости от локализации в ареале (на Bt -растениях или в убежище). Заметим, что в случае, когда коэффициенты $W_{ij} = 1$ (ареал однороден и является убежищем, суммирование уравнений системы (6) приводит к простому логистическому уравнению роста всей популяции.

Результаты исследования. Для решения поставленной задачи в демо-генетическую модель Костицына (1) добавим слагаемые, отвечающие за таксис:

$$\begin{cases} \frac{\partial N_{ss}}{\partial t} + \nabla(N_{ss} v_{ss}) = \delta \Delta N_{ss} + eaRW_{ss} \frac{1}{N} (N_{ss} + \frac{N_{rs}}{2})^2 - \mu N_{ss}, \\ \frac{\partial N_{rs}}{\partial t} + \nabla(N_{rs} v_{rs}) = \delta \Delta N_{rs} + eaRW_{rs} \frac{2}{N} (N_{ss} + \frac{N_{rs}}{2}) * \\ * (N_{rr} + \frac{N_{rs}}{2}) - \mu N_{rs}, \\ \frac{\partial N_{rr}}{\partial t} + \nabla(N_{rr} v_{rr}) = \delta \Delta N_{rr} + eaRW_{rr} \frac{1}{N} (N_{rr} + \frac{N_{rs}}{2})^2 - \mu N_{rr}, \end{cases} \tag{6}$$

где $K_R = (b - \mu)/\alpha$ — ёмкость среды; δ_R — коэффициент диффузии растительного ресурса; W_{ij} — коэффициенты приспособленности к среде вредителя с ij -м генотипом; f_{ij} определяют пропорции распределения потомства вредителя по трем рассматриваемым генотипам ij (ss, sr, rr) (4); $N_{ij} = N_{ij}(x, y, t)$ — плотность генотипа ij в точке $(x, y) \in \Omega$ в момент времени t ($i, j = r$ или s); N_{ss}, N_{rs}, N_{rr} — плотности соответствующих генотипов вредителя; $N = N_{ss} + N_{rs} + N_{rr}$ — общая плотность популяции; μ — коэффициент смертности генотипов; v_{ss}, v_{sr}, v_{rr} , или $v_{ij}(x, y, t)$ — скорости движения вредителей по пространственным переменным x и y соответствующих типов в направлении градиента растительного ресурса.

Для двух видов таксиса (быстрого и медленного) биологический смысл и уравнения, их определяющие, будут приведены ниже. Любой вид характеризуется способностью разыскивать места скопления жертв. Поисковое поведение мотылька моделируется в соответствии с предположением о том, что ускорение перемещения вредителя пропорционально градиенту плотности растений или изменению прироста их биомассы:

$$\frac{dv_{ij}}{dt} = k \nabla R + \delta_v \Delta v_{ij}, \tag{7}$$

где $R = R(x, y, t)$ — прирост биомассы популяции растительного ресурса в точке (x, y) в момент времени t ; $v_{ij}(x, y, t)$ — скорости перемещения вредителей; Δ — оператор Лапласа; ∇ — градиент.

Здесь и далее границы местообитания сообщества предполагаются необитаемыми, то есть как диффузионные, так и адвективные потоки особей через границы отсутствуют:

$$\nabla N_{ij} \cdot n = 0, v \cdot n = 0, (x, y) \in \partial \Omega. \tag{8}$$

Здесь n — внешняя нормаль к границе $\partial \Omega$; Ω — пространственно-двумерная область (ареал вредителя); $(x, y) \in \Omega$ — замыкание области Ω . Такая постановка граничных условий допускает естественную экологическую интерпретацию, а именно пространственную изолированность трофического сообщества.

Рассмотрим теперь уравнения динамики вредителей, где активность вредителей определяется суммой плотностей двух видов насекомых-вредителей:

$$N = N^{(1)} + N^{(2)}, \tag{9}$$

где $N^{(1)}$ и $N^{(2)}$ — плотности вредителей в пассивном и в активном состоянии соответственно.

С учетом уравнения (9) система системы равнений (6) для пассивного поведения вредителей переписывается в виде уравнений (10):

$$\begin{cases}
 \frac{\partial N_{ss}^{(1)}}{\partial t} + \nabla(N_{ss}^{(1)} \mathbf{v}_{ss}^{(1)}) = \delta^{(1)} \Delta N_{ss}^{(1)} + eaR_1 W_{ss} \frac{1}{N^{(1)}} \left(N_{ss}^{(1)} + \frac{N_{rs}^{(1)}}{2} \right)^2 - \mu N_{ss}^{(1)} - \beta N N_{ss}^{(1)}, \\
 \frac{\partial N_{rs}^{(1)}}{\partial t} + \nabla(N_{rs}^{(1)} \mathbf{v}_{rs}^{(1)}) = \delta^{(1)} \Delta N_{rs}^{(1)} + eaR_1 W_{rs} \frac{2}{N^{(1)}} \left(N_{ss}^{(1)} + \frac{N_{rs}^{(1)}}{2} \right) \cdot \left(N_{rr}^{(1)} + \frac{N_{rs}^{(1)}}{2} \right) - \mu N_{rs}^{(1)} - \beta N N_{rs}^{(1)}, \\
 \frac{\partial N_{rr}^{(1)}}{\partial t} + \nabla(N_{rr}^{(1)} \mathbf{v}_{rr}^{(1)}) = \delta^{(1)} \Delta N_{rr}^{(1)} + eaR W_{rr} \frac{1}{N^{(1)}} \left(N_{rr}^{(1)} + \frac{N_{rs}^{(1)}}{2} \right)^2 - \mu N_{rr}^{(1)} - \beta N N_{rr}^{(1)}, \\
 (x, y) \in \Omega(x, y), 0 < t \leq T, \\
 N_{ij}^{(1)}(x_0, y_0, 0) = N_{ij}^*, R_1(x_0, y_0, 0) = R_1^*, \\
 \nabla N_{ij}^{(1)} \cdot \mathbf{n} = 0, \nabla \mathbf{v}_{ij}^{(1)} \cdot \mathbf{n} = 0, (x, y) \in \partial\Omega.
 \end{cases} \quad (10)$$

В активном состоянии, учитывая, что вредитель, неустойчивый к яду, поедает только обычный вид растительного ресурса (а не трансгенную агрокультуру), получаем следующую систему уравнений (11):

$$\begin{cases}
 \frac{\partial N_{ss}^{(2)}}{\partial t} + \nabla(N_{ss}^{(2)} \mathbf{v}^{(2)}) = \delta^{(2)} \Delta N_{ss}^{(2)} + eaR_1 W_{ss} \frac{1}{N^{(2)}} \left(N_{ss}^{(2)} + \frac{N_{rs}^{(2)}}{2} \right)^2 - \mu N_{ss}^{(2)} - \beta N N_{ss}^{(2)}, \\
 \frac{\partial N_{rs}^{(2)}}{\partial t} + \nabla(N_{rs}^{(2)} \mathbf{v}^{(2)}) = \delta^{(2)} \Delta N_{rs}^{(2)} + eaR_1 W_{rs} \frac{2}{N^{(2)}} \left(N_{ss}^{(2)} + \frac{N_{rs}^{(2)}}{2} \right) \cdot \left(N_{rr}^{(2)} + \frac{N_{rs}^{(2)}}{2} \right) - \mu N_{rs}^{(2)} - \beta N N_{rs}^{(2)}, \\
 \frac{\partial N_{rr}^{(2)}}{\partial t} + \nabla(N_{rr}^{(2)} \mathbf{v}^{(2)}) = \delta^{(2)} \Delta N_{rr}^{(2)} + eaR W_{rr} \frac{1}{N^{(2)}} \left(N_{rr}^{(2)} + \frac{N_{rs}^{(2)}}{2} \right)^2 - \mu N_{rr}^{(2)} - \beta N N_{rr}^{(2)}, \\
 (x, y) \in \Omega(x, y), 0 < t \leq T, \\
 N_{ij}^{(2)}(x_0, y_0, 0) = N_{ij}^{**}, R_1(x_0, y_0, 0) = R_1^*, \\
 \nabla N_{ij}^{(2)} \cdot \mathbf{n} = 0, \nabla \mathbf{v}_{ij}^{(2)} \cdot \mathbf{n} = 0, (x, y) \in \partial\Omega.
 \end{cases} \quad (11)$$

Суммированием первых трех уравнений получим (11*):

$$\begin{cases}
 \frac{\partial N_{ss}^{(2)}}{\partial t} + \nabla(N_{ss}^{(2)} \mathbf{v}^{(2)}) = \delta^{(2)} \Delta N_{ss}^{(2)} + eaR_1 N^{(2)} - \mu N_{ss}^{(2)} - \beta N N_{ss}^{(2)}, \\
 (x, y) \in \Omega(x, y), 0 < t \leq T, \\
 N_{ij}^{(2)}(x_0, y_0, 0) = N_{ij}^{**}, R_1(x_0, y_0, 0) = R_1^*, \\
 \nabla N_{ij}^{(2)} \cdot \mathbf{n} = 0, \nabla \mathbf{v}_{ij}^{(2)} \cdot \mathbf{n} = 0, (x, y) \in \partial\Omega.
 \end{cases} \quad (11*)$$

Медленный таксис в пассивном состоянии для трех видов насекомых-вредителей описывается следующими уравнениями (12):

$$\begin{cases}
 \mathbf{v}_{ss}^{(1)} + \alpha \left(\frac{\partial \mathbf{v}_{ss}^{(1)}}{\partial t} + \nabla(N_{ss}^{(1)} \mathbf{v}_{ss}^{(1)}) \right) = \delta_v^{(1)} \Delta \mathbf{v}_{ss}^{(1)} + k^{(1)} \nabla R_1, \\
 \mathbf{v}_{rs}^{(1)} + \alpha \left(\frac{\partial \mathbf{v}_{rs}^{(1)}}{\partial t} + \nabla(N_{rs}^{(1)} \mathbf{v}_{rs}^{(1)}) \right) = \delta_v^{(1)} \Delta \mathbf{v}_{rs}^{(1)} + k^{(1)} \nabla R_1, \\
 \mathbf{v}_{rr}^{(1)} + \alpha \left(\frac{\partial \mathbf{v}_{rr}^{(1)}}{\partial t} + \nabla(N_{rr}^{(1)} \mathbf{v}_{rr}^{(1)}) \right) = \delta_v^{(1)} \Delta \mathbf{v}_{rr}^{(1)} + k^{(1)} \nabla R, \\
 (x, y) \in \Omega(x, y), 0 < t \leq T, \\
 N_{ij}^{(1)}(x_0, y_0, 0) = N_{ij}^*, R(x_0, y_0, 0) = R^*, \\
 \nabla N_{ij}^{(1)} \cdot \mathbf{n} = 0, \nabla \mathbf{v}_{ij}^{(1)} \cdot \mathbf{n} = 0, (x, y) \in \partial\Omega.
 \end{cases} \quad (12)$$

Быстрый таксис в активном состоянии описывается одним уравнением для насекомых-вредителей, устойчивых к яду (13), поскольку при поиске партнера для размножения особенности генотипа не имеют существенного значения:

$$\mathbf{v}^{(2)} = k^{(2)} \nabla N^{(2)} + \delta_v^{(2)} \Delta \mathbf{v}^{(2)}. \quad (13)$$

В уравнениях (12)–(13) все скорости $v_{ij}^{(1)}, v_{ij}^{(2)}, ij \in (ss, sr, rr)$ являются пространственно-двумерными векторами.

Для того чтобы провести линеаризацию системы (3)–(11) с учетом начальных и граничных условий, построим на временном отрезке $0 < t \leq T$, где T — характерный период созревания урожая (от ранней весны до конца лета) равномерную временную сетку ω_τ с шагом по времени τ :

$$\omega_\tau = \{t_k = k\tau, k = 0, 1, \dots, N; N\tau = T\}. \quad (14)$$

На построенной временной сетке строится цепочка линеаризованных начально-краевых задач, связанных на каждом шаге сетки по начальным и финальным значениям. Идея такой линеаризации состоит в том, что все члены соответствующих уравнений нелинейных уравнений с частными производными, содержащие нелинейности, берутся из предыдущего по отношению к текущему временному слою значениями. В случае первого временного слоя используются соответствующие начальные условия.

Обозначим решения цепочки линеаризованных начально-краевых задач так же, как и решение исходной нелинейной задачи (3)–(13).

Вначале, для каждого t_k , начиная с начального момента t_0 определяется скорость медленного и быстрого таксиса из уравнений (15) и (16) соответственно. Значение $k, k = 1, \dots, N$ здесь и далее для систем (15)–(19) фиксировано для всех начально-краевых задач линеаризованной системы уравнений с частными производными, решаемыми на данном временном слое $t_{k-1} < t \leq t_k, k = 1, \dots, N$:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial v_{ij}^{(1),(k)}}{\partial t} + \frac{1}{2}(v_{ij}^{(1),(k)} \nabla N_{ij}^{(1)}(t_{k-1}) + \nabla(N_{ij}^{(1)}(t_{k-1})v_{ij}^{(1),(k)})) + \\ + \frac{1}{\alpha} \Delta v_{ij}^{(1),(k)} = \frac{1}{\alpha} (\delta_v^{(1)} \Delta v_{ij}^{(1),(k)} + k^{(1)} \nabla R_1^{(k-1)}(t_{k-1})), \\ v_{ij}^{(1),(0)} = V_{ij}^*, v_{ij}^{(1),(k)}(t_{k-1}) = v_{ij}^{(1),(k-1)}(t_{k-1}), k = 1, \dots, N, \\ t_{k-1} < t \leq t_k, (x, y) \in \Omega(x, y), \\ N_{ij}^{(1)}(x_0, y_0, t_0) = N_{ij}^{(1)}(x_0, y_0, 0) = N_{ij}^*(x, y), R_1^0(x_0, y_0, 0) = R^*(x, y), \\ \nabla(N_{ij}^{(1)} \cdot n) = 0, \nabla v_{ij}^{(1),(k-1)} \cdot n = 0, ij \in (ss, sr, rr), (x, y) \in \partial\Omega. \end{array} \right. \quad (15)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} v_{ij}^{(2),(k)} = k^{(2)} \nabla N^{(2),(k-1)} + \delta_v^{(2)} \Delta v^{(2),(k)} \\ v_{ij}^{(2),(0)} = V^{**}, N_{ij}^{(2),(0)}(x_0, y_0, t_0) = N_{ij}^{**}(x, y), \\ v_{ij}^{(2),(k)}(t_{k-1}) = v_{ij}^{(2),(k-1)}(t_{k-1}), \\ t_{k-1} < t \leq t_k, k = 1, \dots, N, (x, y) \in \Omega(x, y). \end{array} \right. \quad (16)$$

В соотношениях (15) и (16) $V_{ij}^*, V^{**}, R^*(x, y), N_{ij}^*(x, y), N_{ij}^{**}(x, y)$ — известные функции начальных условий. В целях краткости изложения далее не будем отдельно задавать начальные и граничные условия для систем (17)–(19).

Здесь и далее для системы (17)–(19) значение параметра k фиксировано, является тем же, что и в уравнениях (15)–(16) и одинаково для всех систем (17)–(19) до тех пор, пока соответствующие начально-краевые задачи не будут решены на данном временном интервале $t_{k-1} < t \leq t_k$.

Для системы (3) имеем:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial R_1^{(k)}}{\partial t} = \delta_R \Delta R_1^{(k)} + r_R R_1^{(k)} \left(1 - \frac{R_1^{(k-1)}(t_{k-1}) + R_2^{(k-1)}(t_{k-1})}{K_R}\right) - a R_1^{(k)} (N^{(1),(k-1)}(t_{k-1}) + N^{(2),(k-1)}(t_{k-1})), \\ \frac{\partial R_2^{(k)}}{\partial t} = \delta_R \Delta R_2^{(k)} + r_R R_2^{(k)} \left(1 - \frac{R_1^{(k-1)}(t_{k-1}) + R_2^{(k-1)}(t_{k-1})}{K_R}\right) - a R_2^{(k)} N_{rr}^{(k-1)}(t_{k-1}), \\ R_1^{(k)}(t_{k-1}) = R_1^{(k-1)}(t_{k-1}), R_2^{(k)}(t_{k-1}) = R_2^{(k-1)}(t_{k-1}), \\ t_{k-1} < t \leq t_k, k = 1, \dots, N, (x, y) \in \Omega(x, y). \end{array} \right. \quad (17)$$

Для системы (10)

$$\left\{ \begin{aligned} & \frac{\partial N_{ss}^{(1),(k)}}{\partial t} + \frac{1}{2} (\nabla(N_{ss}^{(1),(k)} v_{ss}^{(1),(k-1)}) + \nabla N_{ss}^{(1),(k)} v_{ss}^{(1),(k-1)}) = \delta^{(1)} \Delta N_{ss}^{(1),(k-1)} + \\ & + ea R_1^{(k-1)}(t_{k-1}) W_{ss} \frac{1}{N^{(1),(k)}} \left(N_{ss}^{(1),(k)} + \frac{N_{rs}^{(1),(k-1)}(t_{k-1})}{2} \right)^2 - \mu N_{ss}^{(1),(k)} - \beta N^{(k)} N_{ss}^{(1),(k)}, \\ & \frac{\partial N_{rs}^{(1),(k)}}{\partial t} + \frac{1}{2} (\nabla(N_{rs}^{(1),(k)} v_{rs}^{(1),(k-1)}) + \nabla N_{rs}^{(1),(k)} v_{rs}^{(1),(k-1)}) = \delta^{(1)} \Delta N_{rs}^{(1),(k-1)} + \\ & + ea R_1^{(k-1)}(t_{k-1}) W_{rs} \frac{1}{N^{(1),(k)}} \left(N_{ss}^{(1),(k-1)}(t_{k-1}) + \frac{N_{rs}^{(1),(k)}}{2} \right), \\ & \left(N_{rr}^{(1),(k-1)}(t_{k-1}) + \frac{N_{rs}^{(1),(k)}}{2} \right) - \mu N_{rs}^{(1),(k)} - \beta N^{(k)} N_{rs}^{(1),(k)}, \\ & \frac{\partial N_{rr}^{(1),(k)}}{\partial t} + \frac{1}{2} (\nabla(N_{rr}^{(1),(k)} v_{rr}^{(1),(k-1)}) + \nabla N_{rr}^{(1),(k)} v_{rr}^{(1),(k-1)}) = \delta^{(1)} \Delta N_{rr}^{(1)} + \\ & + ea (R_1^{(k-1)}(t_{k-1}) + R_2^{(k-1)}(t_{k-1})) W_{rr} \frac{1}{N^{(1),(k)}} \left(N_{rr}^{(1),(k)} + \frac{N_{rs}^{(1),(k-1)}(t_{k-1})}{2} \right)^2 - \mu N_{rr}^{(1),(k)} - \beta N^{(k)} N_{rr}^{(1),(k)}, \\ & R_1^{(k)}(t_{k-1}) = R_1^{(k-1)}(t_{k-1}), R_2^{(k)}(t_{k-1}) = R_2^{(k-1)}(t_{k-1}), \\ & N_{ss}^{(1),(k)}(t_{k-1}) = N_{ss}^{(1),(k-1)}(t_{k-1}), N_{rs}^{(1),(k)}(t_{k-1}) = N_{rs}^{(1),(k-1)}(t_{k-1}), \\ & N_{rr}^{(1),(k)}(t_{k-1}) = N_{rr}^{(1),(k-1)}(t_{k-1}), t_{k-1} < t \leq t_k, k = 1, \dots, N; (x, y) \in \partial\Omega. \end{aligned} \right. \quad (18)$$

Для системы уравнений (11*) имеем линейризованную постановку (19).

Далее все линейризованные начально-краевые задачи аппроксимируются на расширенной равномерной двумерной сетке неявными схемами со вторым порядком точности относительно шагов пространственной сетки и с первым — относительно шага по времени. Учитывая ограниченную скорость перемещения вредителей и симметричную форму записи членов, описывающих таксис (кососимметричность соответствующего сеточного оператора), можно добиться (при выборе достаточно малого шага по времени) выполнения условий применимости сеточного принципа максимума и положительной определенности сеточного оператора для каждого из уравнений системы (15)–(19) в гильбертовом пространстве сеточных функций. Следовательно, получаем устойчивую разностную схему. Ввиду достаточной трудоемкости и объема данные исследования предполагается провести в будущих работах, которые запланированы по этой тематике.

$$\left\{ \begin{aligned} & \frac{\partial v^{(2),(k)}}{\partial t} + \frac{1}{2} (\nabla(N^{(2),(k)} v^{(2),(k-1)}) + \nabla N^{(2),(k)} v^{(2),(k-1)}) = \\ & = \delta_v^{(2)} \Delta N^{(2),(k)} - \beta N^{(k)} N^{(2),(k)}, \\ & R_1^{(k)}(t_{k-1}) = R_1^{(k-1)}(t_{k-1}), R_2^{(k)}(t_{k-1}) = R_2^{(k-1)}(t_{k-1}), \\ & N_{ss}^{(1),(k)}(t_{k-1}) = N_{ss}^{(1),(k-1)}(t_{k-1}), N_{rs}^{(1),(k)}(t_{k-1}) = N_{rs}^{(1),(k-1)}(t_{k-1}), \\ & N_{rr}^{(1),(k)}(t_{k-1}) = N_{rr}^{(1),(k-1)}(t_{k-1}), t_{k-1} < t \leq t_k, k = 1, \dots, N; (x, y) \in \partial\Omega. \end{aligned} \right. \quad (19)$$

Полученная система разностных уравнений, аппроксимирующая цепочку начально-краевых задач (15)–(19) при достаточно малом шаге по времени (сотни либо тысячи секунд), имеет строгое диагональное преобладание. Её целесообразно решать методом Зейделя, который будет сходиться со скоростью геометрической прогрессии.

В целях моделирования возможных сценариев поведения биологической системы, состоящей из хищников и жертв, был разработан комплекс программ [21]. Рассматривается двумерная сетка размером 100×100 ед., шаг по пространству равен 1, шаг по времени равен 0,01. Вес для разностной схемы равен 0,5. В начальный момент времени моделирования концентрация жертв задавалась постоянным значением, равным 1, исходная концентрация хищников приведена на рис. 9, 10. При моделировании изменения концентрации популяций использованы следующие параметры: коэффициенты смертности для растительного ресурса $\beta_1 = \beta_2 = 1$, коэффициент роста хищников примем как произведение коэффициентов эффективности вредителя e и эффективности поиска растительного ресурса вредителем a : $ea = 1$, коэффициенты таксиса $k^{(1)} = k^{(2)} = 40$. Для уравнений (1)–(7) полагаем, что подвижность различных генотипов мотылька одинакова $\delta = 1$ коэффициент смертности вредителей $\mu = 6,84$, емкость среды $K_r = 5 \cdot 10^6$ кг/км², мальтузианский коэффициент прироста $r_r = 25,3$ год⁻¹. Во всех численных экспериментах полагалось, что в начальный момент времени плотность $N^0 = 2,948 \times 10^6$ особей/км² равномерно распределена по пространству.

Согласно предположениям авторов, в начале периода исследования имеются вредители с доминантными (*ss*) и смешанными (*rs*) генами, не обладающими приспособленностью к трансгенам. Вредители с рецессивными признаками (*rr*-генотип) появляются по мере скрещивания уже в конце первого месяца после размножения особей первого поколения. Первые несколько месяцев рецессивные признаки проявляются лишь у особей с медленным таксисом. Динамика вредителей направлена вовнутрь области участка с обычной агрокультурой («убежища»). Здесь, скрещиваясь, насекомые теряют приспособленность к трансгенам.

По мере выедания пищи границы области «сглаживаются», естественным образом выравнивая пространственное распределение вредителей [18, 20, 21]. Поведение вредителей меняется уже на второй год. Динамика вредителей в первые два года значительно меняется от вида их деятельности — едят они или размножаются. Быстрое выедание «обычного» вида растительного ресурса неизбежно ведет вредителей в направлении градиента биомассы трансгенного растительного ресурса. Однако успешное размножение возможно только на участках с «обычными» агрокультурами, что показывает значительное влияние в модели быстрого и медленного таксиса. Тогда движение всех вредителей направлено вне области «убежищ». Выедавая область с обычной агрокультурой, вредители двигаются в направлении увеличения ее биомассы, попадают в область трансгенного поля и, размножаясь здесь, приобретают устойчивость к трансгенным видам растений.

Отметим, что основное поле не может граничить с другими модифицированными агрокультурами. На рис. 1, 2 приведены рекомендации для фермеров с официального сайта компании.

С увеличением общей площади «убежищ» (>20 %) приобретение *Bt*-устойчивости замедляется, что соответствует общепринятым рекомендациям по размерам «обычных» участков на генетически модифицированных полях — от 5 % до 20 % (рис. 1).



Рис. 1. Общепринятые размеры «убежищ»

Расположение участков обычной кукурузы на поле выделено желтым цветом, с трансгенным видом — зелёным (рис. 1, 2). Здесь «полосатость убежищ» может быть неравномерной по всему полю и расположение их зависит от геоклиматических условий (рис. 2).

Рассмотрим теперь динамику распределения вредителей при различных расположениях «убежищ» на поле с модифицированной культурой. Период исследования динамики вредителей $t = 10$ усл. лет. Логично предположить, что границы основного поля должны «опоясываться» кукурузой, не обладающей *Bt*-устойчивостью, чтобы максимально упростить достижение «убежища» вредителем.

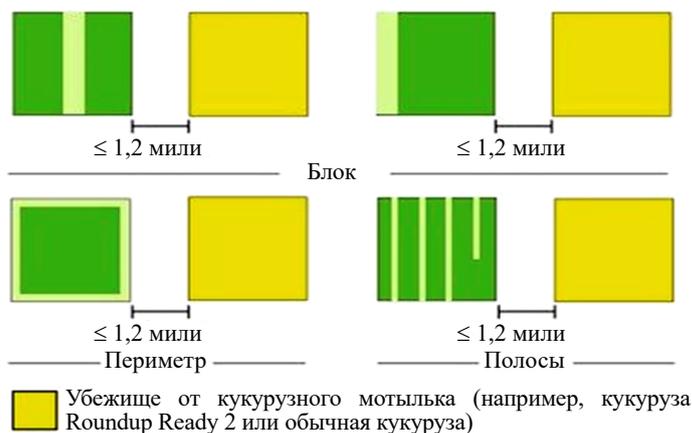


Рис. 2. Расположения участков кукурузы, рекомендуемые Monsanto

Рассмотрим первый тип расположения убежища, когда один участок с «обычной» кукурузой располагается по центру поля.

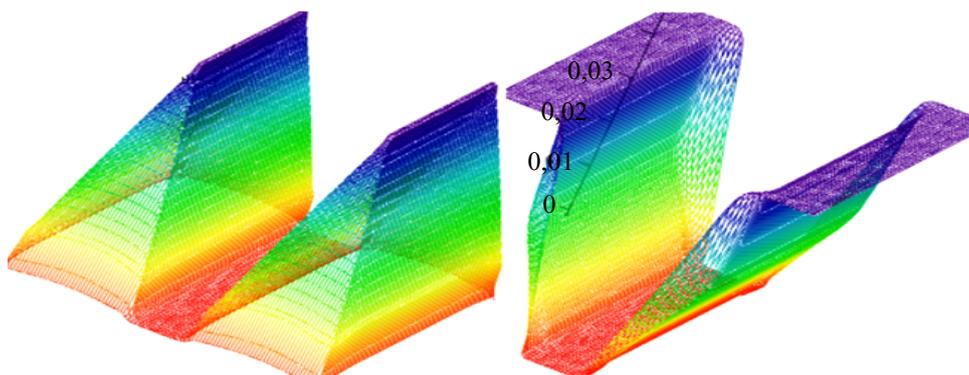


Рис. 3. Выедание растительного ресурса на трансгенном поле с одним «убежищем» при $t = 10$

Выедая безопасные для себя участки с «обычной» агрокультурой, вредитель устремляется в поисках пищи на трансгенную область. Рассмотрим выедание растительного ресурса вредителем более подробно. На рис. 3 показаны две области выедания, когда граница поля обычная и трансгенная культуры. Участки с «обычной» агрокультурой выедаются быстрее.

В мае 2013 года компания RapidEye начала мониторинг крупных сельскохозяйственных участков со спутника, что позволило впервые сравнить результаты численных исследований с реальной картиной агроугодий. Обзор спутниковых снимков Кукурузного пояса США показал преобладание четвертого типа распределения, что легко объяснимо с точки зрения удобства возделывания и обработки поля. Цветовое различие участков (пример соседства «обычного» и модифицированного видов кукурузы представлен на рис. 4) объясняется качеством растений и их приспособленностью к окружающей среде и иммунитетом к вредителям.



Рис. 4. Соседство обычного и модифицированного видов кукурузы¹

Было исследовано влияние пространственной конфигурации убежищ на эффективность стратегии «высокая доза — убежище» для фиксированных значений процента убежища и подвижности вредителя в простейшем случае, когда ареал вредителя представляет собой прямоугольник $\Omega = [0, L_x] \times [0, L_y]$. Численные эксперименты с демо-генетической моделью показали, что для размера всего ареала мотылька 16 км на 16 км расположение единственной полосы убежища в центре всего поля приблизительно вполнину сокращает время T_{10} , способствуя значительному росту уровня заражения *Vt*-поля мотыльком. Разбивка одной полосы «убежища» на несколько полос повышает эффективность убежища.

Сравнение результатов численного моделирования в случаях, когда границы также были «убежищами» или относились к основной трансгенной части поля, показало преимущество первого типа распределения.

Выедание пищи при «полосном» размещении «убежищ» наглядно представлено на рис. 5. Выедание на границе области происходит быстрее, чем в центральных «убежищах», а наличие границ-«убежищ» способствует более быстрому выеданию «обычной» культуры.

¹ Фото с сайта <http://www.monsanto.com>

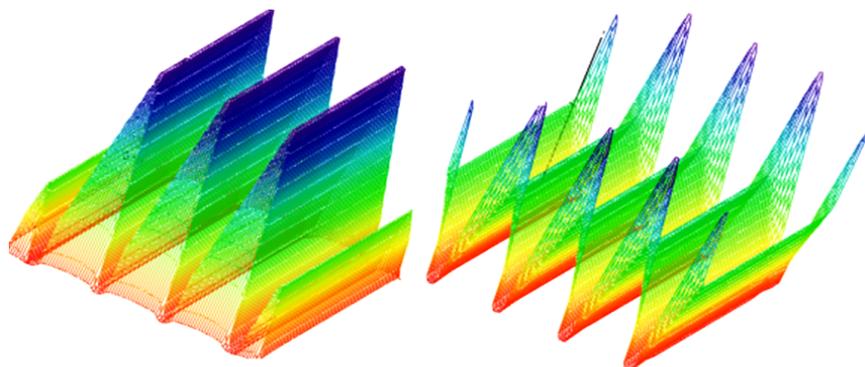


Рис. 5. Выедание растительного ресурса на трансгенном поле с четырьмя «убежищами»

Аналогичный эффект имеет место для убежищ прямоугольной или квадратной формы (рис. 6, 7). Рассмотрим тип расположения убежищ, когда четыре участка квадратной формы с «обычной» кукурузой располагаются по центру трансгенного поля. Наличие «убежищ» разных размеров и расположения оправдано лишь в случае большого разброса высот на данном участке поля. Но в этом случае потребуются разработка трехмерной модели динамики вредителей. Полученный результат подтверждает наше предположение о том, что распределение «убежищ» по площади основного поля не должно касаться границ области, так как иначе мы уменьшаем вероятность попадания вредителей на «убежища».

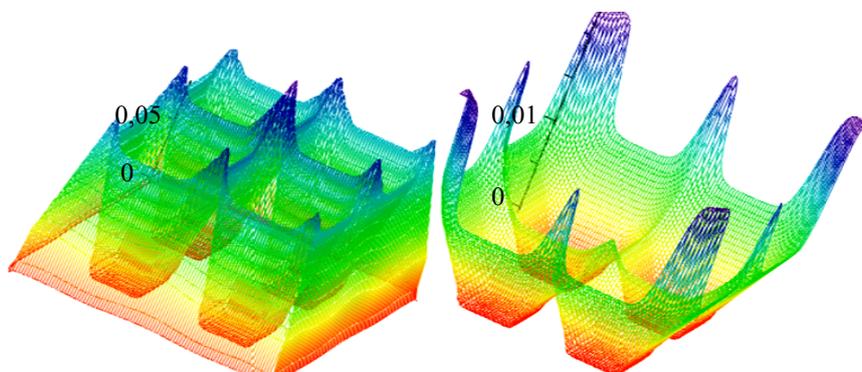


Рис. 6. Выедание растительного ресурса на трансгенном поле с четырьмя прямоугольными «убежищами»

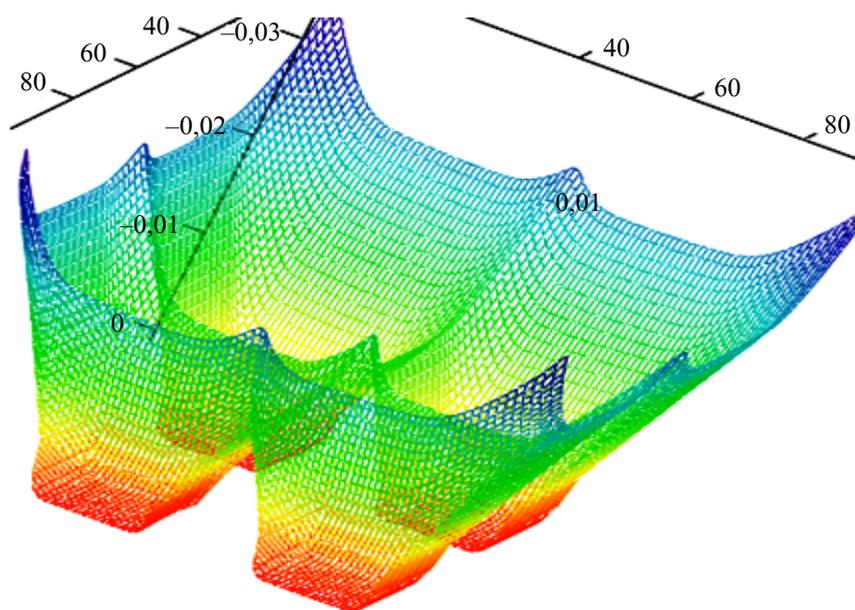


Рис. 7. Выедание растительного ресурса на трансгенном поле с четырьмя квадратными «убежищами»

Прогнозирование динамики вредителей с периодом $t = 100$ показывает, что общая модель поведения вредителей при выедании пищи сохраняется (рис. 7). Наиболее подвергнуты ущербу от насекомых-вредителей листья и плоды растений, что соответствует естественным наблюдениям.

Отметим, что даже с одним «убежищем» в зависимости от селекционных характеристик сорта кукурузы и особенностей ландшафта рисунок выедания может быть весьма необычным (рис. 8).

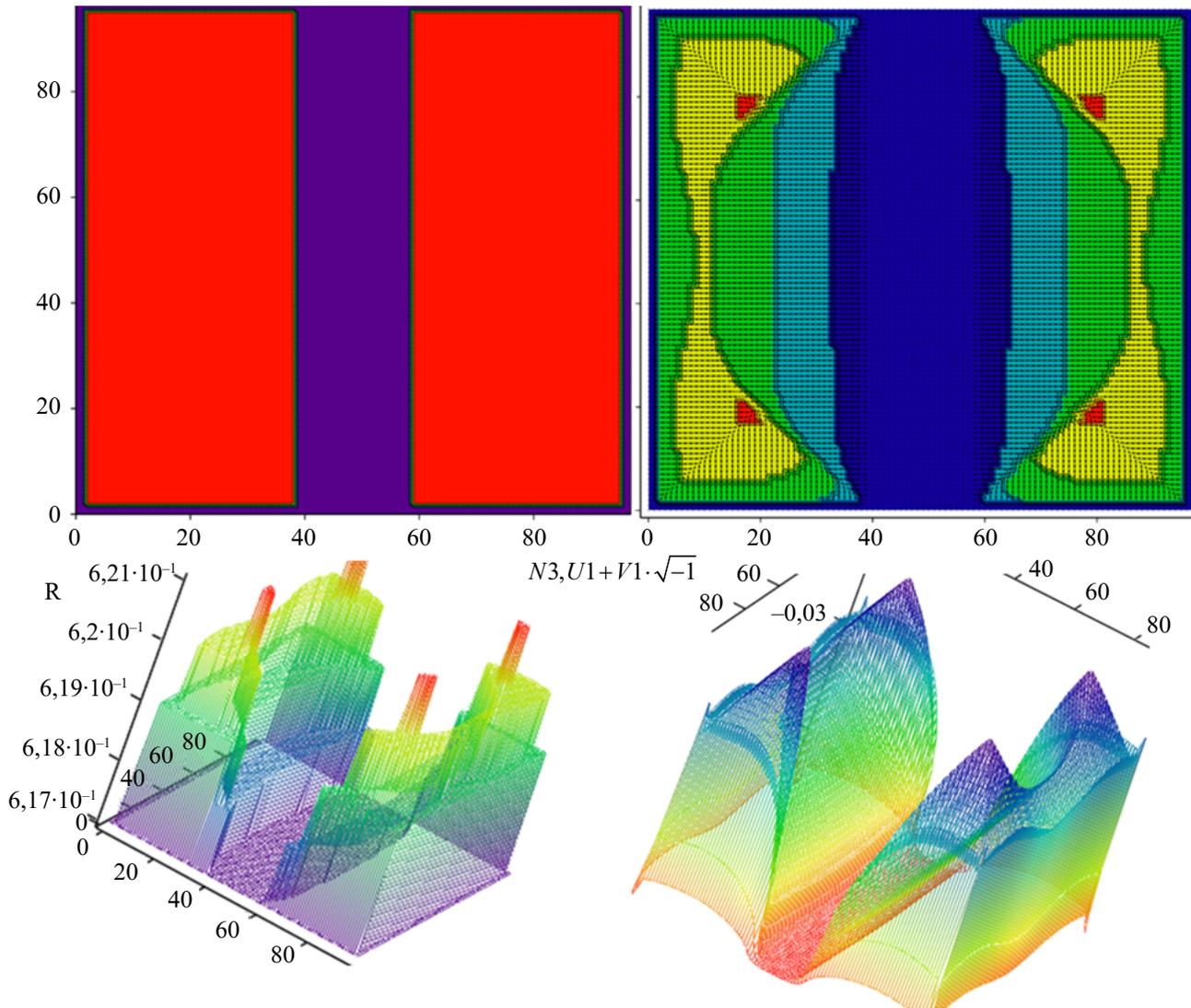


Рис. 8. Прогнозирование динамики вредителей на поле с одним «убежищем»

Число вредителей растет гораздо медленнее относительно уменьшения коэффициентов их смертности, а значит, необходимо исследование влияния других параметров модели на динамику популяций.

Рассмотрим теперь динамику вредителей в зависимости от различных коэффициентов смертности. Для кукурузного мотылька *Ostrinia Nubilalis* он составляет $\mu = 6,845$. Другие вредители кукурузы обладают значительно большей выживаемостью. Пусть в рассматриваемой нами области коэффициенты приспособленности генотипов к среде равны $w_{ss} = w_{rs} = 0,45$, $w_{rr} = 0,1$ (*Bt*-устойчивость составляет 10%), время исследования — 2 года.

На рис. 9 можно наблюдать динамику концентрации при линейном увеличении выживаемости вредителей.

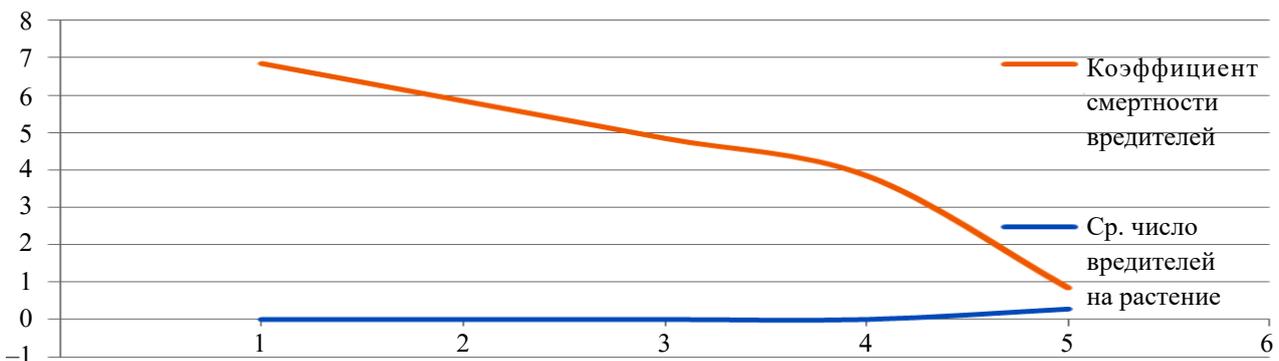


Рис. 9. Динамика концентрации вредителей при различных коэффициентах смертности

Обсуждение и заключение. Несмотря на то, что общая площадь «убежищ» не изменяется по отношению к общей площади поля и составляет 20 %, для большого количества «убежищ» выедание происходит быстрее. Для заданного размера ареала увеличение числа убежищ за счет уменьшения их размеров при сохранении общей площади, выделенной под убежища (20 %), способно снизить эффективность стратегии «высокая доза — убежище». Разумно предположить, что чем проще вредителям попасть в «убежища», тем быстрее они теряют устойчивость к яду. Чтобы максимально упростить достижение «убежищ» вредителем, необходимо уменьшить их размеры, сохраняя соотношение в 20 % от площади основного поля. Главной особенностью рассмотренной модели является разделение вредителей по виду таксиса, что значительно влияет на динамику роста вредителей.

Список литературы / References

1. Kostitzin V. A. *Biologie mathématique*. Librairie Armand Colin. Paris. 1937. 223 p.
2. Volterra V. *Leçons sur la théorie mathématique de la lutte pour la vie*. Paris. Gauthier Villars. 1931. 222 p.
3. Lotka A. J. *Elements of Mathematical Biology*. New York, NY: Dover Publ. Inc.; 1956. 208 p.
4. Свиричев Ю.М., Логофет Д.О. *Устойчивость биологических сообществ*. Москва: Наука; 1978. 352 с.
Svirizhev Y.M., Logofet D.O. *Stability of Biological Communities*. Moscow: Nauka; 1978. 352 p. (in Russ.)
5. Свиричев Ю.М., Пасеков В.П. *Основы математической генетики*. Москва: Наука; 1982. 512 с.
Svirizhev Y.M., Pasekov V.P. *Fundamentals of Mathematical Genetics*. Moscow: Nauka; 1982. 512 p. (in Russ.)
6. Базыкин А.Д. *Математическая биофизика взаимодействующих популяций*. Москва: Наука; 1985. 165 с.
Bazykin A.D. *Mathematical Biophysics of Interacting Populations*. Moscow: Nauka; 1985. 165 p. (in Russ.)
7. Ризниченко Г.Ю., Рубин А.Б. *Математические модели биологических продукционных процессов*. Москва: Издательство МГУ; 1993. 301 с.
Riznichenko G.Yu., Rubin A.B. *Mathematical Models of Biological Production Processes*. Moscow: Moscow State University Press; 1993. 301 p. (in Russ.)
8. Bourguet D., Chaufaux J., Segui M. N., Buisson C., Hinton J. L., Stodola T. J., et al. Frequency of alleles conferring resistance to Bt maize in French and US corn belt populations of the European corn borer, *Ostrinia nubilalis*. *Theoretical and Applied Genetics*. 2003;106(7):1225–1233. <https://doi.org/10.1007/s00122-002-1172-1>
9. Storer N., Peck S., Gould F., Duyn, J., Kennedy G. Spatial Processes in the Evolution of Resistance in *Helicoverpa zea* (Lepidoptera: Noctuidae) to Bt Transgenic Corn and Cotton in a Mixed Agroecosystem: A Biology-Rich Stochastic Simulation Model. *Journal of economic entomology*. 2003;96:156–172. <https://doi.org/10.1603/0022-0493-96.1.156>
10. Vacher C., Bourguet D., Desquilbet M., Lemarié M., Ambec S., Hochberg M.E., Fees or refuges: which is better for the sustainable management of insect resistance to transgenic bt corn? *Biology letters*. 2006;2(2):198–202. <https://doi.org/10.1098/rsbl.2005.0418>
11. Vacher C., Weis A.E., Hermann D., Kossler T.M., Young C. Hochberg M.E. Impact of ecological factors on the initial invasion of bt transgenes into wild populations. *Theoretical and applied genetics*. 2004;109:806-814. <https://doi.org/10.1007/s00122-004-1696-7>
12. Icoz I., Saxena D., Andow D. A., Zwahlen C. and Stotzky G. Microbial populations and enzyme activities in soil in situ under transgenic corn expressing Cry proteins from *Bacillus thuringiensis*. *Journal of Environmental Quality*. 2008;37(2):647–662. <https://doi.org/10.2134/jeq2007.0352>
13. Olson D. M., Andow D. A. Patch size and edges and insect populations in landscapes. *Oecologia*. 2008;155(3):549–558. <https://doi.org/10.1007/s00442-007-0933-6>
14. Тютюнов Ю.В., Сапухина Н.Ю., Моргулис А.Б., Говорухин В.Н. Математическая модель активных миграций как стратегии питания в трофических сообществах. *Журнал общей биологии*. 2001;62(3):253–262.
Tyutyunov, Yu.V., Sapukhina, N.Yu., Morgulis, A.B., Govorukhin, V.N. Mathematical Model of Active Migrations as a Feeding Strategy in Trophic Communities. *Journal of General Biology*. 2001;62(3):253–262. (in Russ.)
15. Жадановская Е.А. *Моделирование пространственно-временной динамики стеблевого кукурузного мотылька под воздействием трансгенной кукурузы*. Дис. канд. физико-математических наук. Ростов-на-Дону; 2006. 171 с.
Zhadanovskaya, E.A. *Modeling the Spatiotemporal Dynamics of the European Corn Borer under the Influence of Transgenic Corn*. PhD Dissertation in Physical and Mathematical Sciences. Rostov-on-Don; 2006. 171 p. (in Russ.)
16. Жадановская Е.А., Тютюнов Ю.В., Ардити Р. Пространственная модель развития устойчивости кукурузного мотылька к трансгенной кукурузе при использовании стратегии «высокая доза – убежище». В: *Материалы XXXII школы-семинара «Мат. моделирование в проблемах рационального природопользования. Экология. Экономика. Информатика»*. Ростов-на-Дону: СКНЦ ВШ; 2004. С. 22–23.
Zhadanovskaya, E.A., Tyutyunov, Yu.V., Arditi, R. A Spatial Model of Corn Borer Resistance Development to Transgenic Corn Using the “High Dose-Refuge” Strategy. In: *Proceedings of the XXXII School-Seminar on Mathematical*

Modeling in Issues of Rational Nature Management. Ecology. Economics. Informatics. Rostov-on-Don: SKNC VSH; 2004. P. 22–23. (in Russ.)

17. Tyutyunov Yu., Zhadanovskaya E., Bourguet D., Arditi R. Landscape refuges delay resistance of the European Corn Borer to Bt-maize: a demo-genetic dynamic model. *Theoretical population biology.* 2008;74(1):138–146. <https://doi.org/10.1016/j.tpb.2008.05.005>

18. Сухинов, А.И., Кажарова И.А. Структура пространственного распределения кукурузы как следствие процессов динамической самоорганизации. В: *Материалы Международного Российско-Азербайджанского симпозиума «Уравнения смешанного типа и родственные проблемы анализа и информатики»*. Нальчик: Редакция журнала Эльбрус; 2008. С. 157–158.

Sukhinov, A.I., Kazharova, I.A. The Structure of the Spatial Distribution of Corn as a Consequence of Dynamic Self-Organization Processes. In: *Proceedings of the International Russian-Azerbaijan Symposium “Mixed-Type Equations and Related Problems of Analysis and Informatics”*. Nalchik: Elbrus Journal Editorial; 2008. P. 157–158. (in Russ.)

19. Пасеков В.П. Популяционная изменчивость и биометрические модели координации признаков организма. *Журнал общей биологии.* 2010;71(1):7–18.

Pasekov, V.P. Population Variability and Biometric Models of Trait Coordination in Organisms. *Journal of General Biology.* 2010;71(1):7–18. (in Russ.)

20. Ильичев В.Г. Эволюционная устойчивость биологических сообществ. *Журнал общей биологии.* 2010;71(1):63–74.

Ilyichev, V.G. Evolutionary Stability of Biological Communities. *Journal of General Biology.* 2010;71(1):63–74. (in Russ.)

21. Ляпунова И.А. Об одной демогенетической модели адаптации насекомых к изменению кормовой базы. *Известия ЮФУ. Технические науки.* 2013;4(141):235–239.

Lyapunova, I.A. On a Demo-Genetic Model of Insect Adaptation to Changes in the Food Base. *Izvestiya SFedU. Technical Sciences.* 2013;4(141):235–239. (in Russ.)

22. Сухинов А.И., Чистяков А.Е., Проценко Е.А., Проценко С.В. *Моделирование сложных систем*. Ростов-на-Дону: Донской государственный технический университет; 2019. 241 с.

Sukhinov, A.I., Chistyakov, A.E., Protsenko, E.A., Protsenko, S.V. *Modeling Complex Systems*. Rostov-on-Don: Don State Technical University; 2019. 241 p. (in Russ.)

23. Сухинов А.И., Чистяков А.Е., Сидорякина В.В., Проценко С.В. Разностная схема с оптимальным весом для уравнения диффузии-конвекции. *Вычислительные методы и программирование.* 2019;20(3):283–292. <https://doi.org/10.26089/NumMet.v20r325>

Sukhinov, A.I., Chistyakov, A.E., Sidoryakina, V.V., Protsenko, S.V. A Difference Scheme with Optimal Weight for the Diffusion-Convection Equation. *Computational Methods and Programming.* 2019;20(3):283–292. (in Russ.) <https://doi.org/10.26089/NumMet.v20r325>

Об авторах:

Александр Иванович Сухинов, член-корреспондент РАН, доктор физико-математических наук, профессор, директор НИИ Математического моделирования и прогнозирования сложных систем, Донской государственный технический университет (344003, Российская Федерация, г. Ростов-на-Дону, пл. Гагарина, 1), [ORCID](#), [MathSciNet](#), [SPIN-код](#), [ResearcherID](#), [ScopusID](#), sukhinov@gmail.com

Ирина Артуровна Бугаева, кандидат технических наук, доцент института компьютерных технологий и информационной безопасности, Южный федеральный университет (344006, Российская Федерация, г. Ростов-на-Дону, ул. Б. Садовая, 105/42), [ORCID](#), [MathSciNet](#), [SPIN-код](#), [ResearcherID](#), [ScopusID](#), ialyapunova@sfedu.ru

Заявленный вклад авторов: все авторы сделали эквивалентный вклад в подготовку публикации.

Конфликт интересов: авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Все авторы прочитали и одобрили окончательный вариант рукописи.

About the Authors:

Alexander I. Sukhinov, Corresponding member of RAS, Dr.Sci. (Phys.-Math), Professor, Director of the Research Institute “Mathematical Modelling and Forecasting of Complex Systems”, Don State Technical University (1, Gagarin Sq., Rostov-on-Don, 344003, Russian Federation), [ORCID](#), [MathSciNet](#), [SPIN-code](#), [ResearcherID](#), [ScopusID](#), sukhinov@gmail.com

Irina A. Bugayeva, PhD in Technology, Associate Professor at the Institute of Computer Technologies and Information Security, Southern Federal University (105/42, B. Sadovaya St., Rostov-on-Don, 344006, Russian Federation), [ORCID](#), [MathSciNet](#), [SPIN-code](#), [ResearcherID](#), [ScopusID](#), ialyapunova@sfedu.ru

Claimed Contributorship: all authors have made an equivalent contribution to the preparation of the publication.

Conflict of Interest Statement: the authors declare no conflict of interest.

All authors have read and approved the final manuscript.

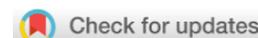
Поступила в редакцию / Received 26.08.2024

Поступила после рецензирования / Revised 09.09.2024

Принята к публикации / Accepted 12.09.2024

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

MATHEMATICAL MODELLING



УДК 519.6

Оригинальное теоретическое исследование

<https://doi.org/10.23947/2587-8999-2024-8-3-23-33>


Модифицированный метод Бубнова-Галеркина для решения краевых задач с линейным обыкновенным дифференциальным уравнением

Н.К. Волосова¹ , К.А. Волосов² , А.К. Волосова² , Д.Ф. Пастухов³  , Ю.Ф. Пастухов³ 

¹ Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана, г. Москва, Российская Федерация

² Российский университет транспорта, г. Москва, Российская Федерация

³ Полоцкий государственный университет им. Евфросинии Полоцкой, г. Новополоцк, Республика Беларусь

 dmitrij.pastuhov@mail.ru

Аннотация

Введение. Рассматривается решение краевых задач на отрезке с линейными обыкновенными дифференциальными уравнениями, в которых коэффициенты и правая часть являются непрерывными функциями. Условия ортогональности невязки уравнения координатным функциям дополняются системой линейно независимых краевых условий задачи. Число координатных функций m должно быть больше порядка n дифференциального уравнения.

Материалы и методы. Для численного решения краевой задачи предложена система линейно независимых координатных функций на симметричном отрезке $[-1, 1]$ с единичной нормой Чебышева каждой функции системы. Применен модифицированный метод Петрова-Галеркина с включением линейно независимых краевых условий исходной задачи в систему линейных алгебраических уравнений. Применена интегральная квадратурная формула с двенадцатым порядком погрешности для вычисления скалярного произведения двух функций.

Результаты исследования. Получен критерий существования и единственности решения краевой задачи, при условии, что известны n линейно независимых решений однородного дифференциального уравнения. Получены формулы для матричных коэффициентов и коэффициентов правой части системы линейных алгебраических уравнений для вектора разложения решения по системе координатных функций. Формулы получены для линейных дифференциальных уравнений второго и третьего порядков. Модифицированный метод Бубнова-Галеркина сформулирован для уравнения произвольного порядка.

Обсуждение и заключение. Полученные формулы обобщенного метода Бубнова-Галеркина могут быть полезными для решения краевых задач с линейными обыкновенными дифференциальными уравнениями. Численно решены три краевых задачи с уравнениями второго и третьего порядков, равномерная норма невязки не превышает 10^{-11} .

Ключевые слова: численные методы, обыкновенные дифференциальные уравнения, краевые задачи, метод Галеркина, гидродинамика

Для цитирования. Волосова Н.К., Волосов К.А., Волосова А.К., Пастухов Д.Ф., Пастухов Ю.Ф. Модифицированный метод Бубнова-Галеркина для решения краевых задач с линейным обыкновенным дифференциальным уравнением. *Computational Mathematics and Information Technologies*. 2024;8(3):23–33. <https://doi.org/10.23947/2587-8999-2024-8-3-23-33>

A Modified Bubnov-Galerkin Method for Solving Boundary Value Problems with Linear Ordinary Differential Equations

Natalya K. Volosova¹ , Konstantin A. Volosov² , Aleksandra K. Volosova² ,
Dmitriy F. Pastukhov³  , Yuriy F. Pastukhov³ 

¹ Bauman Moscow State Technical University, Moscow, Russian Federation

² Russian University of Transport, Moscow, Russian Federation

³ Polotsk State University named after Euphrosyne of Polotsk, Novopolotsk, Republic of Belarus

Abstract

Introduction. The paper considers the solution of boundary value problems on an interval for linear ordinary differential equations, in which the coefficients and the right-hand side are continuous functions. The conditions for the orthogonality of the residual equation to the coordinate functions are supplemented by a system of linearly independent boundary conditions. The number of coordinate functions m must exceed the order n of the differential equation.

Materials and Methods. To numerically solve the boundary value problem, a system of linearly independent coordinate functions is proposed on a symmetric interval $[-1, 1]$, where each function has a unit Chebyshev's norm. A modified Petrov-Galerkin method is applied, incorporating linearly independent boundary conditions from the original problem into the system of linear algebraic equations. An integral quadrature formula with twelfth-order error is used to compute the scalar product of two functions.

Results. A criterion for the existence and uniqueness of a solution to the boundary value problem is obtained, provided that n linearly independent solutions of the homogeneous differential equation are known. Formulas are derived for the matrix coefficients and the coefficients of the right-hand side in the system of linear algebraic equations for the vector expansion of the solution in terms of the coordinate function system. These formulas are obtained for second- and third-order linear differential equations. The modified Bubnov-Galerkin method is formulated for differential equations of arbitrary order.

Discussion and Conclusions. The derived formulas for the generalized Bubnov-Galerkin method may be useful for solving boundary value problems involving linear ordinary differential equations. Three boundary value problems with second- and third-order differential equations are numerically solved, with the uniform norm of the residual not exceeding 10^{-11} .

Keywords: numerical methods, ordinary differential equations, boundary value problems, Galerkin method, hydrodynamics

For citation. Volosova N.K., Volosov K.A., Volosova A.K., Pastukhov D.F., Pastukhov Yu.F. A Modified Bubnov-Galerkin Method for Solving Boundary Value Problems with Linear Ordinary Differential Equations. *Computational Mathematics and Information Technologies*. 2024;8(3):23–33. <https://doi.org/10.23947/2587-8999-2024-8-3-23-33>

Введение. Краевые задачи с обыкновенными дифференциальными уравнениями можно классифицировать по порядку уравнения. Например, в задачах гидродинамики — первого [1], второго [2] или третьего порядка [3–4].

Для решения краевых задач на отрезке с обыкновенными дифференциальными уравнениями наиболее известны метод прогонки и метод стрельбы [5]. Неизвестная функция в указанных методах отыскивается на заданной сетке (так называемая сеточная функция). В данной работе решение находится в функциональном виде, для чего предложена система линейно независимых координатных функций, гладких и ограниченных по модулю на симметричном отрезке $[-1, 1]$. Неизвестная функция-решение раскладывается по базису линейно независимых координатных функций. Методом Бубнова-Галеркина в работе [6], где невязка дифференциального или интегрального уравнения ортогональна координатным функциям, из условий ортогональности находят коэффициенты разложения решения задачи по базису.

В работе [7] показано, что в простейшей классической вариационной задаче (краевой задаче) необходимо искать решение на классе допустимых функций, определяемом краевыми условиями. Именно эту идею авторы использовали в модифицированном методе Бубнова-Галеркина, включив $n-1$ (n — порядок уравнения) линейно независимых краевых условий в систему m линейных алгебраических уравнений. При этом число условий ортогональности равно $m-n+1$ (m — число координатных функций). В данной работе модифицированный метод Бубнова-Галеркина используется в краевых задачах с уравнениями второго и третьего порядков.

Материалы и методы. Пусть неизвестная функция $u(x) \in C^n[a, b]$, n раз непрерывно дифференцируемая, является решением краевой задачи с обыкновенным дифференциальным уравнением порядка n с переменными коэффициентами $g_i(x), i = 0, n$

$$\begin{cases} L[u(x)] = f(x), x \in (a, b), \\ L[u(x)] \equiv \left(\sum_{i=0}^n g_i(x) \frac{d^i}{dx^i} \right) u(x). \end{cases} \quad (1)$$

$$\begin{cases} \sum_{i=0}^{n-1} (\alpha_{\mu}^i u^{(i)}(a)) = \gamma_{\mu}, \mu = \overline{1, k}, \\ \sum_{i=0}^{n-1} (\beta_{\mu}^i u^{(i)}(b)) = \gamma_{\mu}, \mu = \overline{k+1, n}. \end{cases} \quad (2)$$

В краевой задаче (1)–(2) функции $g_i(x) (i = \overline{0, n}), f(x) \in C[a, b]$ заданы и непрерывны на отрезке $[a, b]$. Первые k уравнений в системе (2) представляют собой краевые условия в точке $x = a$, а последние $n - k$ уравнений — краевые условия в точке $x = b$. Для замкнутости задачи (1) необходимо, чтобы полное число краевых условий было равно n . Матрицы коэффициентов $\alpha_{\mu}^i, \beta_{\mu}^i, i = \overline{0, n-1}, \mu = \overline{1, n}$, а также числа $\gamma_{\mu}, \mu = \overline{1, n}$ заданы.

Краевые условия вида (2) называются разделенными. Именно связь между числами $\alpha_{\mu}^i, \beta_{\mu}^i$ определяет существование и единственность решения краевой задачи (1)–(2).

Утверждение 1. Пусть известно n линейно независимых частных решений однородного уравнения (1) $U_j(x), j = \overline{1, n}$. Тогда краевая задача (1)–(2) имеет единственное решение тогда и только тогда, когда выполнено условие $\det A_{\mu j} \neq 0, \mu = \overline{1, n}, j = \overline{1, n}$, где

$$A_{\mu j} = \begin{cases} \sum_{i=0}^{n-1} \alpha_{\mu}^i U_j^{(i)}(a), \mu = \overline{1, k} \\ \sum_{i=0}^{n-1} \beta_{\mu}^i U_j^{(i)}(b), \mu = \overline{k+1, n}. \end{cases}$$

Доказательство. Запишем общее решение уравнения (1)

$$u(x) = \sum_{j=1}^n U_j(x) D_j + \overline{u(x)}, j = \overline{1, n}.$$

Здесь D_j — произвольные постоянные интегрирования, $\overline{u(x)}$ — частное решение неоднородного уравнения (1), $U_j(x)$ — частные линейно независимые решения однородного уравнения (1).

Подставим решение $u(x)$ в краевые условия (2):

$$\begin{aligned} \sum_{i=0}^{n-1} (\alpha_{\mu}^i u^{(i)}(a)) &= \sum_{i=0}^{n-1} \alpha_{\mu}^i \left(\sum_{j=1}^n U_j^{(i)}(a) D_j + \overline{u^{(i)}(a)} \right) = \gamma_{\mu} \Leftrightarrow, \\ \sum_{j=1}^n \left(\sum_{i=0}^{n-1} \alpha_{\mu}^i U_j^{(i)}(a) \right) D_j &= \gamma_{\mu} - \sum_{i=0}^{n-1} \alpha_{\mu}^i \overline{u^{(i)}(a)}, \mu = \overline{1, k}. \end{aligned} \quad (3)$$

Аналогично для точки $x = b$ получим:

$$\sum_{j=1}^n \left(\sum_{i=0}^{n-1} \beta_{\mu}^i U_j^{(i)}(b) \right) D_j = \gamma_{\mu} - \sum_{i=0}^{n-1} \beta_{\mu}^i \overline{u^{(i)}(b)}, \mu = \overline{k+1, n}. \quad (4)$$

Неоднородная система n линейных алгебраических уравнений (3)–(4) относительно неизвестных $D_j, j = \overline{1, n}$ имеет единственное решение тогда и только тогда, когда детерминант матрицы $\det A_{\mu j} \neq 0, \mu = \overline{1, n}, j = \overline{1, n}$, где

$$A_{\mu j} = \begin{cases} \sum_{i=0}^{n-1} \alpha_{\mu}^i U_j^{(i)}(a), \mu = \overline{1, k} \\ \sum_{i=0}^{n-1} \beta_{\mu}^i U_j^{(i)}(b), \mu = \overline{k+1, n}. \end{cases} \quad (5)$$

Утверждение 1 доказано.

Рассмотрим простой вариант задачи (1) с обыкновенным дифференциальным уравнением (ОДУ) второго порядка с краевыми условиями Дирихле:

$$\begin{cases} L[u(x)] = f(x), x \in (a, b) \\ L[u(x)] \equiv \left[g_2(x) \frac{d^2}{dx^2} + g_1(x) \frac{d}{dx} + g_0(x) \right] u(x) \\ u(a) = u_a, u(b) = u_b. \end{cases} \quad (6)$$

Обобщим метод Бубнова-Галеркина, предложенный в работе [6] для решения интегральных уравнений Фредгольма второго рода, на решение задачи Дирихле с ОДУ второго порядка (6).

Выберем систему координатных функций $\varphi_i(x)$:

$$\{\varphi_i(x)\}_{i=0}^m = \left\{ \left(\frac{2x-a-b}{b-a} \right)^i, x \in [a, b], i = \overline{0, m} \right\}. \quad (7)$$

Утверждение 2. Координатные функции системы (7) $\varphi_i(x) \in C^\infty[a, b]$ ограничены по модулю, дифференцируемы любое число раз и линейно независимы.

Доказательство проведем от противного. Используем линейное отображение $z = \frac{2x - a - b}{b - a} \in [-1, 1], x \in [a, b]$, взаимно однозначно отображающее отрезок $x \in [a, b]$ на симметричный отрезок $z \in [-1, 1]$. Такой простой метод используют авторы учебника [5] в задаче построения интегральных квадратурных формул. Предположим, что система координатных функций линейно зависима и с учетом переменной z имеет вид $\{\varphi_i(z) = z^i, z \in [-1, 1], i = \overline{0, m}\}$. Если система функций линейно зависима, то существует нетривиальное решение $(\alpha_0, \alpha_1, \dots, \alpha_m)$ уравнения $\alpha_0 + \alpha_1 z + \alpha_2 z^2 + \dots + \alpha_m z^m \equiv 0 \forall z \in [-1, 1]$.

Последнее уравнение имеет не более, чем m действительных решений, в то время как требуется решение последнего уравнения для всех точек отрезка $z \in [-1, 1]$. Полученное противоречие доказывает линейную независимость функций системы (7). Функции (7) бесконечно непрерывно дифференцируемы по переменной x как полиномы конечной степени, а также ограничены, поскольку $\|\varphi_i\|_C = \max_{z \in [-1, 1]} |z^i| = 1$. **Утверждение 2** доказано.

Применим метод Бубнова-Галеркина с системой линейно независимых координатных функций (7) к решению краевой задачи Дирихле (6). Симметричный отрезок $z \in [-1, 1]$ в нашей задаче приводит к одному порядку погрешности в симметричных относительно середины отрезка $c = (a + b) / 2$ узлах и в целом уменьшает норму погрешности.

Разложим решение по линейно-независимой системе координатных функций

$$u(x) = u(c) + \sum_{j=1}^m \varphi_j(x) C_j = u(c) + \sum_{j=1}^m \left(\frac{2(x-c)}{b-a} \right)^j C_j. \quad (8)$$

В формуле (8) коэффициенты C_j неизвестны и подлежат определению.

Из формулы (8) следует тождество $u(c) = u(c)$, а сама формула напоминает разложение неизвестной функции в ряд Тейлора с центром $x = c = (a + b) / 2$, однако ни самой функции, ни ее производных мы не знаем. Подставим (8) в уравнение (6) и запишем невязку уравнения (6):

$$R(u(x)) = L[u(x)] - f(x) = L \left(u(c) + \sum_{j=1}^m \varphi_j(x) C_j \right) - f(x) = L(u(c)) + \sum_{j=1}^m L\varphi_j(x) C_j - f(x).$$

Метод Бубнова-Галеркина является ортогональным, поэтому потребуем ортогональность невязки максимальному числу координатных функций, $\{1, z, z^2, \dots, z^{m-2}\}$ всего $m-1$ функций, которые дают максимальный вклад в невязку уравнения (6):

$$\langle R(u(x)), \varphi_i(x) \rangle = 0, i = \overline{0, m-2} \Leftrightarrow \sum_{j=1}^m \langle L\varphi_j(x), \varphi_i(x) \rangle C_j = \langle f(x) - L(u(c)), \varphi_i(x) \rangle, i = \overline{0, m-2}. \quad (9)$$

В формуле (9) введено обозначение:

$$\langle f, g \rangle = \int_a^b f(x)g(x)dx, \quad L(u(c)) = g_0(x)u(c) = g_0(x)u_c.$$

В отличие от метода [6, стр. 140], последнее условие с номером m для системы линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) относительно m неизвестных $C_j, j = \overline{1, m}$, получим из краевых условий

$$\frac{u_b - u_a}{2} = C_1 + C_3 + \dots + \begin{cases} C_{m-1}, m = 2l \\ C_m, m = 2l + 1. \end{cases} \quad (10)$$

Покажем справедливость формулы (10). На концах отрезка в точках $x = a, x = b$, используя разложение (8), получим:

$$u(a) \equiv u_a = u(c) + \sum_{j=1}^m \left(\frac{2a - a - b}{b - a} \right)^j C_j = u_c + \sum_{j=1}^m (-1)^j C_j, u(b) \equiv u_b = u(c) + \sum_{j=1}^m \left(\frac{2b - a - b}{b - a} \right)^j C_j = u_c + \sum_{j=1}^m C_j.$$

Складывая два последних уравнения и выражая $u(c) = u_c$, получим

$$u_c = \left(\frac{u_a + u_b}{2} \right) - C_2 - C_4 - \dots - \begin{cases} C_m, m = 2l \\ C_{m-1}, m = 2l + 1. \end{cases} \quad (11)$$

Аналогично, вычитая из второго уравнения u_b первое u_a и выражая $\frac{u_b - u_a}{2}$, получим формулу (10). Подставим значение $u(c)$ из формулы (11) в правую часть уравнения (9), затем перенесем в левую часть уравнения (9) все слагаемые с C_j и получим СЛАУ на коэффициенты C_j :

$$\sum_{j=1}^m a_{i,j} C_j = \overline{f_i}, \quad i = \overline{0, m-1}. \quad (12)$$

Элементы матрицы $a_{i,j}, i = \overline{0, m-1}, j = \overline{1, m}$ и коэффициенты правой части $\overline{f_i}$ в системе уравнений (12) определены ниже:

$$a_{i,j} = \begin{cases} \langle L\varphi_j, \varphi_i \rangle, & \text{если } j \equiv 1 \pmod{2}, i = \overline{0, m-2} \\ \langle L(\varphi_j - 1), \varphi_i \rangle, & \text{если } j \equiv 0 \pmod{2}, i = \overline{0, m-2} \\ 1, & \text{если } i = m-1, j \equiv 1 \pmod{2} \\ 0, & \text{если } i = m-1, j \equiv 0 \pmod{2} \end{cases},$$

$$\overline{f_i} = \begin{cases} \left\langle f(x) - L\left(\frac{u_a + u_b}{2}\right), \varphi_i(x) \right\rangle, & \text{если } i = \overline{0, m-2} \\ \frac{u_b - u_a}{2}, & \text{если } i = m-1 \end{cases},$$

$$L\left(\frac{u_a + u_b}{2}\right) = \left(\frac{u_a + u_b}{2}\right) g_0(x).$$

Замечание 1. Использовать два крайних условия Дирихле $u(a), u(b)$ в СЛАУ (12) невозможно, так как условия линейно зависимы.

Доказательство. Подставим в выражения $u(a), u(b)$ значение $u(c) = u_c$ из формулы (11):

$$u(c) = \left(\frac{u_a + u_b}{2}\right) - C_2 - C_4 - \dots - \begin{cases} C_m, m = 2l \\ C_{m-1}, m = 2k+1 \end{cases}, u_a = u_c + \sum_{j=1}^m (-1)^j C_j = \left(\frac{u_a + u_b}{2}\right) - \left(C_1 + C_3 + \dots + \begin{cases} C_{m-1}, m = 2l \\ C_m, m = 2l+1 \end{cases}\right).$$

Последнее выражение равносильно (10).

$$u_b = u_c + \sum_{j=1}^m C_j = \left(\frac{u_a + u_b}{2}\right) + C_1 + C_3 + \dots + \begin{cases} C_{m-1}, m = 2l \\ C_m, m = 2l+1 \end{cases}.$$

Последняя формула также равносильна (10), что доказывает линейную зависимость крайних условий.

Замечание 2. В формулах (12) для матричных коэффициентов a_{ij} в четных столбцах дифференциальный оператор L действует на неположительную функцию $\varphi(x)-1$, а в нечетных столбцах на знакопеременную координатную функцию $\varphi(x)$. Если детерминант матрицы СЛАУ (12) не равен нулю, то численное решение (12) является единственным. Запишем формулы дифференцирования линейного оператора L по формуле (6) координатных функций (8):

$$\begin{cases} L\varphi_0 = g_0(x), & \text{если } j = 0, \\ L\varphi_1 = \frac{2g_1(x)}{(b-a)} + g_0(x) \left(\frac{2x-a-b}{b-a}\right), & \text{если } j = 1, \\ L\varphi_j = 4j(j-1)g_2(x) \frac{(2x-a-b)^{j-2}}{(b-a)^j} + 2jg_1(x) \frac{(2x-a-b)^{j-1}}{(b-a)^j} + g_0(x) \left(\frac{2x-a-b}{b-a}\right)^j, & \text{если } j \geq 2. \end{cases} \quad (13)$$

Учитывая (11), численное решение задачи Дирихле (6) можно привести к выражению (14), преобразуя формулу (8):

$$u(x) = \left(\frac{u_a + u_b}{2}\right) + \sum_{j=1}^m \left[\left(\frac{(2x-a-b)^j}{b-a}\right) + \left(\frac{-1+(-1)^{j+1}}{2}\right) \right] C_j. \quad (14)$$

Из (12) следует, что вектор C , входящий в формулу (14), имеет вид $C = A^{-1} \overline{f}$.

Оценим $u(x)$ по модулю с учетом формулы $C = A^{-1} \overline{f}$

$$|u(x)| \leq \frac{|u_a| + |u_b|}{2} + 2 \sum_{j=1}^m |C_j| \leq \frac{|u_a| + |u_b|}{2} + 2m \max_{j=1, m} C_j = \frac{|u_a| + |u_b|}{2} + 2m \|C\|_C \leq \frac{|u_a| + |u_b|}{2} + 2m \|A^{-1}\|_C \|f\|_C \Rightarrow$$

$$\|u\|_C \leq \frac{|u_a| + |u_b|}{2} + 2m \|A^{-1}\|_C \|\overline{f}\|_C.$$

Известно, что норма $\|B\|_C$ произвольной квадратной матрицы $B(m \times m)$ определяется формулой $\|B\|_C = \max_{i=1, m} \sum_{j=1}^m |b_{i,j}|$.

В работе [9] получена составная квадратурная интегральная формула с равномерным шагом и с 12-м порядком погрешности $O(h^{12})$, которую использует программа для вычисления всех матричных элементов a_{ij} , а также коэффициентов правой части \bar{f}_i СЛАУ (12) через скалярное произведение двух функций:

$$\langle y_1, y_2 \rangle = \int_a^b y_1(x)y_2(x)dx = 5h \sum_{i=0}^{n_1} y_1(x_i)y_2(x_i)C_i + O(h^{12}), \quad n_1 = 10p, \quad h = \frac{b-a}{n_1}, \quad p \in N, \quad (15)$$

где весовые коэффициенты интегральной квадратурной формулы (15) определяются величиной остатка по модулю 10 от номера узла равномерной сетки i :

$$C_i = \begin{cases} \frac{16067}{299376}, & \text{если } i=0 \text{ или } i=n_1, \\ \frac{16067}{149688}, & \text{если } i \equiv 0 \pmod{10} \text{ и } (0 < i < n_1), \\ \frac{26575}{74844}, & \text{если } i \equiv 1 \pmod{10} \text{ или } i \equiv 9 \pmod{10}, \\ \frac{-16175}{99792}, & \text{если } i \equiv 2 \pmod{10} \text{ или } i \equiv 8 \pmod{10}, \\ \frac{5675}{6237}, & \text{если } i \equiv 3 \pmod{10} \text{ или } i \equiv 7 \pmod{10}, \\ \frac{-4825}{5544}, & \text{если } i \equiv 4 \pmod{10} \text{ или } i \equiv 6 \pmod{10}, \\ \frac{17807}{12474}, & \text{если } i \equiv 5 \pmod{10}. \end{cases}$$

Приведем примеры численного решения краевых задач алгоритмом (12)–(15).

Пример 1 [10]. Решить краевую задачу Дирихле

$$y'' - y = 2x, \quad y(0) = 0, \quad y(1) = -1, \quad x \in [0, 1]. \quad (16)$$

Точное решение $y(x) = sh(x) / sh(1) - 2x$.

Программа на языке Fortran, где функции и переменные заданы с двойной точностью по алгоритму (12)–(15), дает векторную норму Чебышева разности точного и приближенного решения $\|y - u\|_C = 4,218847493575595E - 015$, если число координатных функций $m = 11$, число интервалов для вычисления скалярного произведения функций формулой (15) на равномерной сетке равно $n_1 = 50$, $\|y - u\|_C = \max_{i=0, n_1} |y(x_i) - u(x_i)|, x_i = a + hi, h = \frac{b-a}{n_1}$.

Обратная матрица A^{-1} в системе линейных алгебраических уравнений (12) вычисляется библиотекой линейной алгебры msimsl для отыскания вектора коэффициентов разложения $C_j, j = 1, m$.

Пример 2 [9]. Решить задачу Дирихле для уравнения Пуассона на прямоугольнике

$$\begin{cases} u_{xx} + u_{yy} = e^y \sin x, & 0 < x < \pi, 0 < y < \pi \\ u|_{x=0} = u|_{x=\pi} = u|_{y=0} = u|_{y=\pi} = 0. \end{cases}$$

Решение задачи ищем в виде $u(x) = \sin(x)f(y)$. Такой выбор решения автоматически выполняет два краевых условия $u|_{y=0} = u|_{y=\pi} = 0$. Подставим решение $u(x)$ в уравнение Пуассона $\sin(x)(f''(y) - f(y)) = e^y \sin(x), \forall x \in (0, \pi)$. Получим краевую задачу Дирихле для $f(y)$:

$$\begin{cases} f''(y) - f(y) = e^y \\ f(0) = f(\pi) = 0. \end{cases} \quad (17)$$

Последнее краевое условие Дирихле $f(0) = f(\pi) = 0$ в (17) выполняет краевые условия исходной задачи $u|_{y=0} = u|_{y=\pi} = 0$.

Общее решение однородного уравнения (17) $f''(y) - f(y) = 0$ можно записать как $f_{o.o}(y) = A \operatorname{ch}(y) + B \operatorname{sh}(y)$, а частное решение неоднородного уравнения ищем в виде

$$f_q(y) = Cye^y, \quad f_q''(y) = Ce^y(y+2), \quad f_q'' - f_q = Ce^y(y+2) - Cye^y = e^y \Leftrightarrow 2C = 1, C = \frac{1}{2}.$$

Запишем общее решение неоднородного уравнения (17)

$$f_{o,n}(y) = A \operatorname{ch}(y) + B \operatorname{sh}(y) + \frac{ye^y}{2}, f_{o,n}(0) = 0 \Rightarrow A = 0, f_{o,n}(\pi) = 0 \Rightarrow B = \frac{-\pi e^\pi}{2 \operatorname{sh}(\pi)},$$

$$f(y) = \frac{ye^y \operatorname{sh}(\pi) - \pi e^\pi \operatorname{sh}(y)}{2 \operatorname{sh}(\pi)}, u(x, y) = \left(\frac{ye^y \operatorname{sh}(\pi) - \pi e^\pi \operatorname{sh}(y)}{2 \operatorname{sh}(\pi)} \right) \sin(x) \text{ — точное решение задачи из примера 2.}$$

Решая численно краевую задачу (17) с помощью алгоритма (12)–(15), получим норму Чебышева для разности численного и приближенного решения с числом координатных функций $m = 11$, числом интервалов для вычисления скалярного произведения функций на равномерной сетке $n_1 = 100$, $\|f - f_{num}\|_C = 8,079448221565144E - 011$.

Оценим равномерную норму вычислительной погрешности в примере 2 алгоритмом (12)–(15)

$$\|u - u_{num}\|_C \leq \|f - f_{num}\|_C \|\sin(x)\|_C = \|f - f_{num}\|_C \approx 8 \cdot 10^{-11}.$$

В гидродинамике [3, 4] встречаются краевые задачи с дифференциальным уравнением третьего порядка. Рассмотрим пример 3.

Пример 3.

$$\begin{cases} u'''(x) + u'(x) = -2 \sin(x), x \in (0, \pi), \\ u(0) = 0, u'(0) = 0, u(\pi) = 0. \end{cases} \quad (18)$$

Решим однородное уравнение $u'''(x) + u'(x) = 0$. Его характеристическое уравнение и собственные числа равны $\lambda^3 + \lambda = 0 \Leftrightarrow \lambda_1 = 0, \lambda_{2,3} = \pm i = \pm \sqrt{-1}$, которым соответствуют 3 частных линейно независимых решения

$$\{U_1(x) = 1, U_2(x) = \sin(x), U_3(x) = \cos(x)\}, \{U'_1(x) = 0, U'_2(x) = \cos(x), U'_3(x) = -\sin(x)\},$$

$$\{U''_1(x) = 0, U''_2(x) = -\sin(x), U''_3(x) = -\cos(x)\}.$$

Проверим существование и единственность решения краевой задачи (18). Запишем элементы матрицы по формуле (5):

$$\alpha_1^0 = 1; \alpha_1^1 = 0; \alpha_1^2 = 0; \alpha_2^0 = 0; \alpha_2^1 = 1; \alpha_2^2 = 0; \beta_3^0 = 1; \beta_3^1 = 0; \beta_3^2 = 0,$$

$$A_{ij} = \begin{cases} \sum_{i=0}^{n-1} \alpha_\mu^i U_j^{(i)}(a), \mu = \overline{1, k} \\ \sum_{i=0}^{n-1} \beta_\mu^i U_j^{(i)}(b), \mu = \overline{k+1, n}, k = 2, n = 3. \end{cases}$$

$$A_{11} = 1 \cdot 1 + 0 \cdot 0 + 0 \cdot 0 = 1, A_{21} = 0 \cdot 1 + 1 \cdot 0 + 0 \cdot 0 = 0, A_{31} = 1 \cdot 1 + 0 \cdot 0 + 0 \cdot 0 = 1,$$

$$A_{12} = 1 \cdot \sin(0) + 0 \cdot \cos(0) + 0 \cdot (-\sin(0)) = 0, A_{22} = 0 \cdot \sin(0) + 1 \cdot \cos(0) + 0 \cdot (-\sin(0)) = 1,$$

$$A_{32} = 1 \cdot \sin(\pi) + 0 \cdot \cos(\pi) + 0 \cdot (-\sin(\pi)) = 0, A_{13} = 1 \cdot \cos(0) + 0 \cdot (-\sin(0)) + 0 \cdot (-\cos(0)) = 1,$$

$$A_{23} = 0 \cdot \cos(0) + 1 \cdot (-\sin(0)) + 0 \cdot (-\cos(0)) = 0, A_{33} = 1 \cdot \cos(\pi) + 0 \cdot (-\sin(\pi)) + 0 \cdot (-\cos(\pi)) = -1.$$

Так как $\begin{vmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \end{vmatrix} = -2 \neq 0$, то краевая задача (18) имеет единственное решение.

Непосредственной проверкой убедимся, что точным решением краевой задачи (18) является функция

$$u(x) = x \sin(x), u'(x) = \sin(x) + x \cos(x), u''(x) = 2 \cos(x) - x \sin(x),$$

$$u'''(x) = -3 \sin(x) - x \cos(x), u'''(x) + u'(x) = -3 \sin(x) - x \cos(x) + \sin(x) + x \cos(x) = -2 \sin(x), u(0) = u(\pi) = u'(0) = 0.$$

Утверждение 1 для краевой задачи (18) выполнено, следовательно, решение задачи единственно и совпадает с $u(x) = x \sin(x)$. Других решений нет.

Вычислим первую производную $u(x)$ по формуле (8) и приравняем ее к нулю в точке $x = a$.

$$u'(x) = \sum_{j=1}^m \varphi'_j(x) C_j = \sum_{j=1}^m \frac{2j}{(b-a)} \left(\frac{(2x-a-b)}{b-a} \right)_{x=a}^{j-1} C_j = 0 \Leftrightarrow C_1 - 2C_2 + 3C_3 - \dots + m(-1)^{m-1} C_m = 0. \quad (19)$$

Для краевой задачи с дифференциальным уравнением третьего порядка (18) получим систему уравнений

$$\sum_{j=1}^m a_{i,j} C_j = \overline{f_i}, i = \overline{0, m-1}. \quad (20)$$

$$a_{i,j} = \begin{cases} \langle L\varphi_j, \varphi_i \rangle, \text{ если } j \equiv 1 \pmod{2}, i = \overline{0, m-3} \\ \langle L(\varphi_j - 1), \varphi_i \rangle, \text{ если } j \equiv 0 \pmod{2}, i = \overline{0, m-3} \\ 1, \text{ если } i = m-2, j \equiv 1 \pmod{2} \\ 0, \text{ если } i = m-2, j \equiv 0 \pmod{2} \\ j(-1)^{j-1}, \text{ если } i = m-1 \end{cases},$$

$$\bar{f}_i = \begin{cases} \left\langle f(x) - L\left(\frac{u_a + u_b}{2}\right), \varphi_i(x) \right\rangle, \text{ если } i = \overline{0, m-3} \\ \frac{u_b - u_a}{2}, \text{ если } i = m-2 \\ 0, \text{ если } i = m-1 \end{cases},$$

$$\begin{cases} L\varphi_0 = g_0(x), \text{ если } j = 0, \\ L\varphi_1 = \frac{2g_1(x)}{(b-a)} + g_0(x) \left(\frac{2x-a-b}{b-a} \right), \text{ если } j = 1, \\ L\varphi_2 = 8g_2(x) \frac{1}{(b-a)^2} + 4g_1(x) \frac{(2x-a-b)}{(b-a)^2} + g_0(x) \left(\frac{2x-a-b}{b-a} \right)^2, \text{ если } j = 2, \\ L\varphi_j = 8j(j-1)(j-2)g_2(x) \frac{(2x-a-b)^{j-3}}{(b-a)^j} + \\ + 4j(j-1)g_2(x) \frac{(2x-a-b)^{j-2}}{(b-a)^j} + 2jg_1(x) \frac{(2x-a-b)^{j-1}}{(b-a)^j} + g_0(x) \frac{(2x-a-b)^j}{(b-a)^j}, \text{ если } j \geq 3. \end{cases} \quad (21)$$

$$u(x) = \left(\frac{u_a + u_b}{2} \right) + \sum_{j=1}^m \left[\left(\frac{2x-a-b}{b-a} \right)^j + \left(\frac{-1+(-1)^{j+1}}{2} \right) \right] C_j. \quad (22)$$

Обратная матрица A^{-1} вычисляется библиотекой линейной алгебры `msimsl` для отыскания вектора коэффициентов разложения $C_j, j = 1, m$, с использованием коэффициентов системы линейных алгебраических уравнений (20). Программа с использованием формул (14), (20), (21), (22) дает численное u_i^{num} и точное $u_i^{exact} = x_i \sin(x_i)$ решение задачи (18) на равномерной сетке $x_i = a + h \cdot i, i = \overline{0, n_1}, h = \frac{b-a}{n_1}, n_1 = 50, a = 0, b = \pi$. Число координатных функций $m = 15$. Численное и точное решение данной задачи представлено в таблице 1.

Таблица 1

Решение задачи (18)

x_i	u_i^{num}	u_i^{exact}	$u_i^{num} - u_i^{exact}$
0,000000000E+000	0,000000000E+000	0,000000000E+000	0,00000000E+000
0,12566370614359	1,5749838632E-002	1,5749838632E-002	3,36702887793E-013
0,25132741228718	6,2502585803E-002	6,2502585803E-002	-7,5051076464E-014
0,37699111843077	0,1387796868382	0,1387796868384	-2,2543078515E-013
0,50265482457436	0,2421558085434	0,2421558085436	-2,5310309403E-013
0,62831853071795	0,3693163660978	0,3693163660980	-2,3742119381E-013
0,75398223686155	0,5161363581649	0,5161363581652	-2,1926904736E-013
0,87964594300514	0,6777788480392	0,6777788480394	-2,0117241206E-013
1,00530964914873	0,8488110105527	0,8488110105529	-1,7474910407E-013
1,13097335529233	1,0233352874866	1,0233352874867	-1,4477308241E-013
1,25663706143592	1,1951328658964	1,1951328658966	-1,3122836151E-013

x_i	u_i^{num}	u_i^{exact}	$u_i^{num} - u_i^{exact}$
1,38230076757951	1,3578164206656	1,3578164206658	-1,4432899320E-013
1,50796447372310	1,5049888502957	1,5049888502959	-1,6875389974E-013
1,63362817986669	1,6304045878204	1,6304045878205	-1,7497114868E-013
1,75929188601028	1,72812998993818	1,72812998993833	-1,5254464358E-013
1,88495559215388	1,79269929884481	1,79269929884493	-1,2145839889E-013
2,01061929829747	1,81926273330968	1,81926273330979	-1,1013412404E-013
2,13628300444106	1,80372339742481	1,80372339742493	-1,2212453270E-013
2,26194671058465	1,74285989495849	1,74285989495861	-1,2412293415E-013
2,38761041672824	1,63443180085643	1,63443180085651	-8,038014698286E-014
2,51327412287183	1,47726546439236	1,47726546439237	-5,1070259132E-015
2,63893782901543	1,27131799485423	1,27131799485419	4,50750547997E-014
2,76460153515902	1,01771770348181	1,01771770348179	2,17603712826E-014
2,89026524130261	0,71877973673595	0,71877973673604	-9,7144514654E-014
3,01592894744620	0,37799612718318	0,37799612718362	-4,3676173788E-013
3,07876080051800	0,193316990170226	0,193316990171009	-7,8290152139E-013
3,14159265358979	3,8472143247E-016	-1,0104259667E-015	1,39514739920E-015

В первом столбце таблицы 1 указано значение узла x_i равномерной сетки, во втором столбце записано численное решение u_i^{num} , в третьем столбце точное решение u_i^{exact} в узлах x_i . В последнем столбце находится их разность $u_i^{num} - u_i^{exact}$.

В примере 3 программа дает норму погрешности $\|u_i^{num} - u_i^{exact}\|_C = \max_{i=0, n_1} |u_i^{num} - u_i^{exact}| \approx 7,829E - 013$.

Результаты исследования. Авторами получен следующий алгоритм модифицированного метода Бубнова-Галеркина:

- в краевой задаче с обыкновенным дифференциальным уравнением порядка n необходимо выбрать систему $m+1$ координатных функций $\{1, z, z^2, \dots, z^m, m > n\}$;
- из n краевых условий выбрать систему линейно независимых условий (в случае заданных значений функции u_a, u_b независимых условий $n-1$), включить независимые краевые условия в СЛАУ;
- потребовать, чтобы первые $m-(n-1) = m-n+1$ координатные функции были ортогональны невязке дифференциального уравнения. Тогда в неоднородной системе линейных алгебраических уравнений $m-n+1+n-1 = m$ строк и m неизвестных $C_j, j = \overline{1, m}$.

Обсуждение и заключение. Основные результаты, полученные авторами:

1. Предложена система координатных функций, бесконечно дифференцируемых, ограниченных, линейно независимых на отрезке $[-1, 1]$ для решения краевой задачи с линейным дифференциальным уравнением порядка n .
2. Впервые предложен модифицированный метод Бубнова-Галеркина, в котором система линейных алгебраических уравнений (12), (20) включает $n-1$ краевое условие задачи.
3. Для случая, когда известны n линейно независимых решений линейного однородного дифференциального уравнения, получен критерий (5) существования и единственности решения краевой задачи с разделенными краевыми условиями (Утверждение 1).
4. Модифицированный алгоритм Бубнова-Галеркина предложен для краевых задач с уравнениями второго и третьего порядков (12)–(15) и (20)–(22).
5. Модифицированным алгоритмом численно решены 3 примера с равномерной нормой погрешности не более, чем 10^{-11} .

Список литературы / References

1. Морозова Е.А. Разрешимость краевой задачи для системы обыкновенных дифференциальных уравнений. *Вестник Пермского университета. Математика. Механика. Информатика.* 2010;3(3):46–50.
Morozova E.A. Solvability of a boundary value problem for a system of ordinary differential equations. *Bulletin of Perm University. Mathematics. Mechanics. Computer science.* 2010;3(3):46–50. (in Russ.)
2. Абдуллаев А.Р., Скачкова Е.А. Об одной многоточечной краевой задаче для дифференциального уравнения второго порядка. *Вестник Пермского университета. Математика. Механика. Информатика.* 2014;2(25):5–9.

About the Authors:

Natalya K. Volosova, Post-graduate Student of Bauman Moscow State Technical University (5–1, 2nd Baumanskaya St., Moscow, Russian Federation, 105005), [ORCID](#), navalosova@yandex.ru

Konstantin A. Volosov, Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor of the Department of Applied Mathematics of the Russian University of Transport (9–9, Obraztsova St., Moscow, GSP-4, Russian Federation, 127994), [ORCID](#), konstantinvolosov@yandex.ru

Aleksandra K. Volosova, Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Chief Analytical Department “Tramplin” LLC, Russian University of Transport (9–9, Obraztsova St., Moscow, GSP-4, Russian Federation, 127994), [ORCID](#), alya01@yandex.ru

Dmitriy F. Pastukhov, Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor of Polotsk State University (29, Blokhin St., Novopolotsk, 211440, Republic of Belarus), [ORCID](#), dmitrij.pastuhov@mail.ru

Yuriy F. Pastukhov, Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor of Polotsk State University (29, Blokhin St., Novopolotsk, 211440, Republic of Belarus), [ORCID](#), pulsar1900@mail.ru

Contributions of the authors: all authors have made an equivalent contribution to the preparation of the publication.

Conflict of Interest Statement: the authors declare no conflict of interest.

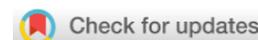
All authors have read and approved the final manuscript.

Поступила в редакцию / Received 30.07.2024

Поступила после рецензирования / Revised 19.08.2024

Принята к публикации / Accepted 26.08.2024

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ MATHEMATICAL MODELLING



УДК 532.517.2:536.24

Оригинальное теоретическое исследование

<https://doi.org/10.23947/2587-8999-2024-8-3-34-42>



Математическое моделирование воздействия ИК-лазерного излучения на встречный поток наночастиц с метаном

Е.Е. Пескова¹ , В.Н. Снытников²

¹ Мордовский государственный университет им. Н.П. Огарёва, г. Саранск, Российская Федерация

² Институт катализа Сибирского отделения Российской академии наук, г. Новосибирск, Российская Федерация

e.e.peskova@math.mrsu.ru

Аннотация

Введение. Работа посвящена численному исследованию воздействия лазерного излучения на встречный двухфазный поток наночастиц с многокомпонентным газом из углеводородов. При таком воздействии увеличивается содержание водорода в продуктах и происходит связывание метана в углеводороды более сложного строения на поверхности каталитических наночастиц и в газовой фазе. Горячие стенки трубы являются источником основного прогрева реакционной двухфазной среды с каталитическими наночастицами.

Материалы и методы. В качестве основного метода используется математическое моделирование, включающее численное решение системы уравнений вязкой газопылевой двухфазной среды с учетом химических реакций и лазерного излучения. Модель позволяет одновременно учитывать двухфазную газопылевую среду, многокомпонентность и многотемпературность среды, обыкновенные дифференциальные уравнения (ОДУ) для температуры каталитических наночастиц, ОДУ химической кинетики, эндотермические эффекты радикально-цепных реакций, диффузию легких метильных радикалов CH_3 и атомов водорода H , которые инициируют конверсию метана, поглощение лазерного излучения этиленом и частицами.

Результаты исследования. Получены распределения параметров, характеризующих ламинарные дозвуковые течения газопылевой среды в осесимметричной трубе с химическими реакциями. Показано, что поглощение лазерного излучения этиленом во встречном потоке приводит к резкому увеличению конверсии метана и преимущественному выходу ароматических соединений.

Обсуждение и заключение. Численное моделирование динамики реакционных двухфазных сред представляет интерес для разработки теоретических основ переработки метана в ценные продукты. Полученные результаты естественным образом подтверждают вывод о необходимости совместного использования средств математического моделирования и лабораторных экспериментов для разработки новых ресурсосберегающих и экономически обоснованных технологий переработки природного газа.

Ключевые слова: математическое моделирование, дозвуковые потоки, двухфазная среда, лазерное излучение, химические реакции

Финансирование. Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания Института катализа СО РАН (проект FWUR–2024–0033).

Для цитирования. Пескова Е.Е., Снытников В.Н. Математическое моделирование воздействия ИК-лазерного излучения на встречный поток наночастиц с метаном. *Computational Mathematics and Information Technologies*. 2024;8(3):34–42. <https://doi.org/10.23947/2587-8999-2024-8-3-34-42>

Mathematical Modelling of the Impact of IR Laser Radiation on an Oncoming Flow of Nanoparticles with Methane

Elizaveta E. Peskova¹  , Valeriy N. Snytnikov² 

¹National Research Mordovia State University, Saransk, Russian Federation

²Boreskov Institute of Catalysis SB RAS, Novosibirsk, Russian Federation

 e.e.peskova@math.mrsu.ru

Abstract

Introduction. The study is devoted to the numerical investigation of laser radiation's effect on an oncoming two-phase flow of nanoparticles and multicomponent hydrocarbon gases. Under such exposure, the hydrogen content in the products increases, and methane is bound into more complex hydrocarbons on the surface of catalytic nanoparticles and in the gas phase. The hot walls of the tube serve as the primary source of heat for the reactive two-phase medium containing catalytic nanoparticles.

Materials and Methods. The main method used is mathematical modelling, which includes the numerical solution of a system of equations for a viscous gas-dust two-phase medium, taking into account chemical reactions and laser radiation. The model accounts for the two-phase gas-dust medium's multicomponent and multi-temperature nature, ordinary differential equations (ODEs) for the temperature of catalytic nanoparticles, ODEs of chemical kinetics, endothermic effects of radical chain reactions, diffusion of light methyl radicals CH₃ and hydrogen atoms H, which initiate methane conversion, as well as absorption of laser radiation by ethylene and particles.

Results. The distributions of parameters characterizing laminar subsonic flows of the gas-dust medium in an axisymmetric tube with chemical reactions have been obtained. It is shown that the absorption of laser radiation by ethylene in the oncoming flow leads to a sharp increase in methane conversion and a predominance of aromatic compounds in the product output.

Discussion and Conclusion. Numerical modelling of the dynamics of reactive two-phase media is of interest for the development of theoretical foundations for the processing of methane into valuable products. The results obtained confirm the need for joint use of mathematical modelling and laboratory experiments in the development of new resource-saving and economically viable technologies for natural gas processing.

Keywords: mathematical modelling, subsonic flows, two-phase medium, laser radiation, chemical reactions

Funding information. The work was supported by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation as part of the state assignment for the Boreskov Institute of Catalysis SB RAS (project FWUR–2024–0033).

For citation. Peskova E.E., Snytnikov V.N. Mathematical modelling of the IR laser radiation's effect on the oncoming flow of nanoparticles with methane. *Computational Mathematics and Information Technologies*. 2024;8(3):34–42. <https://doi.org/10.23947/2587-8999-2024-8-3-34-42>

Введение. В лазерной термохимии рассматривается воздействие лазерного излучения на спутный двухфазный поток метана и каталитических наночастиц [1, 2]. В таком потоке при температурах свыше 1000 К метан превращается в этилен, ацетилен, водород, ароматические соединения [3, 4]. Химические реакции превращений углеводородов в газовой фазе и на каталитической поверхности наночастиц относятся к цепным с участием радикалов, что требует своего описания большим числом компонентов и стадий, включая конвективную и диффузионную динамику активных радикалов [5]. Эти химические реакции в целом определяют эндотермический процесс, который сдвигается в сторону больших выходов продуктов при дополнительном поглощении энергии. Подобное поглощение может обеспечить инфракрасное (ИК) излучение CO₂ лазера, направляемое вдоль по потоку в начальную зону химических превращений [2]. В то же время случай, когда лазерное излучение направляется на встречный поток в область высоких конверсий метана, представляет отдельный интерес. Рассмотрение этого случая является целью этой публикации.

Сложность многокомпонентных химических процессов вместе с тепло-массообменом требует математического моделирования дозвуковых течений реакционной двухфазной среды газа и твердых ультрадисперсных частиц. Для расчетов динамики подобных сред авторами разработаны собственный CFD код [2]. В этом коде в комплексе рассматриваются дозвуковая многокомпонентная газодинамика с изменением объема из-за химических реакций, динамика многокомпонентной пыли, гетерогенно-гомогенная кинетика радикальных цепных реакций для углеводородов, перенос и поглощение излучения. В качестве упрощения модели течение среды рассматривается в осесимметричной постановке в цилиндрическом 2D пространстве.

Материалы и методы

Математическая модель. ИК-лазерное излучение возбуждает колебательные степени свободы у молекул этилена, который появляется в химических газофазных реакциях и на поверхности каталитически активных нано-

частиц. Тепловая релаксация этилена, поглотившего лазерное излучение, ведет к нагреву всех компонентов газа. Теплообмен между газом и наночастицами, который идет в свободномолекулярном режиме при диаметрах наночастиц в первых десятках нанометров, стремится привести температуры частиц и газа к тепловому равновесию. Обогреваемые стенки трубы обеспечивают основную долю энергии, необходимой для высоко эндотермической конверсии метана.

Для изучения воздействия лазерного излучения на встречный поток метана и наночастиц используем математическую модель из системы уравнений вязкой газопылевой двухфазной среды с учетом химических реакций и лазерного излучения [1, 2], которая основана на системе уравнений Навье-Стокса в приближении малых чисел Маха [6, 7]. Эта система уравнений описывает существенно дозвуковые течения ($M \ll 1$) с изменением объема, малым изменением давления с одновременным увеличением скорости в разы за счет химических реакций, лазерного излучения, теплообменом между газом и частицами и диссипативных процессов.

Математическая модель представляет собой систему уравнений параболического типа по времени и эллиптическую по пространству в силу решения уравнения для динамической составляющей давления. Модель позволяет одновременно учитывать: двухфазную газопылевую среду; многокомпонентность и многотемпературность среды; ОДУ для температуры каталитических наночастиц; ОДУ химической кинетики; эндотермические эффекты радикально-цепных реакций; диффузию легких метильных радикалов CH_3 и атомов водорода H , которые инициируют конверсию метана; поглощение лазерного излучения этиленом и частицами.

Уравнения переноса массы компонент газовой смеси:

$$\frac{\partial \rho_g Y_m}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_g Y_m \vec{v}) = -\nabla \cdot \vec{J}_m + R_m, \quad m = \overline{1, M}. \quad (1)$$

Уравнения переноса массы наночастиц:

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_i \vec{v}) = 0, \quad i = \overline{1, N}. \quad (2)$$

Уравнение переноса импульса:

$$\frac{\partial \rho \vec{v}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \vec{v}) + \nabla \pi = \nabla \cdot \vec{\tau}. \quad (3)$$

Уравнение для энтальпии газа и частиц:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\rho_g h_g + \sum_i \rho_i h_i \right) + \nabla \cdot \left(\left(\rho_g h_g + \sum_i \rho_i h_i \right) \vec{v} \right) = -\nabla \cdot \vec{q} - \sum_i 4\pi s_i^2 n_i \sigma (T_i^4 - T_g^4) + \left(n_g \alpha + \sum_{i=1}^N n_i \alpha_i \right) F. \quad (4)$$

Условие на дивергенцию вектора скорости:

$$S \equiv \nabla \cdot \vec{v} = \frac{1}{\rho_g C_p T_g} \left(-\sum_{i=1}^N \rho_i \frac{C_p (T_g - T_i)}{\zeta_i} \right) + \frac{1}{\rho_g C_p T_g} \left(\nabla \cdot \lambda \nabla T_g + \sum_m \rho_g D_{m,mix} \nabla Y_m \nabla h_m \right) + \frac{1}{\rho_g} \sum_m \frac{M_w}{M_{wm}} \left(\nabla \cdot \rho_g D_{m,mix} \nabla Y_m \right). \quad (5)$$

Уравнение для интенсивности излучения:

$$\frac{dF}{dl} + \left(n_g \alpha + \sum_{i=1}^N n_i \alpha_i \right) F = 0. \quad (6)$$

Уравнения для температуры наночастиц:

$$\frac{dT_i}{dt} = \frac{1}{m_i C_{DV}} \left(\alpha_i F - 4\pi s_i^2 \sigma (T_i^4 - T_g^4) - a\pi \frac{s_i^2}{2} p_g c_i \frac{\gamma+1}{\gamma-1} \left(\frac{T_i}{T_g} - 1 \right) - Q \cdot R \right). \quad (7)$$

Уравнения химической кинетики:

$$\frac{\partial \rho_g Y_m}{\partial t} = R_m, \quad m = \overline{1, M}. \quad (8)$$

Здесь ρ_g — плотность газовой смеси; Y_m — массовая доля компоненты газа; M — количество компонент в газовой смеси; \vec{J}_m — вектор диффузионного потока; R_m — скорость образования или расхода m -ой компоненты смеси; \vec{v} — скорость потока газа и частиц; ρ_i — плотность частицы; N — количество фракций частиц; $\rho = \rho_g + \sum_{i=1}^N \rho_i$ — суммарная плотность газа и частиц; $\pi = \rho_g - \rho_0$ — динамическая составляющая давления; ρ_g — давление; ρ_0 — давление, постоянное в области; $\vec{\tau}$ — тензор вязких напряжений; h_g — энтальпия газа; h_i — энтальпия каждой фрак-

ции частиц; \vec{q} — вектор потока тепла; n_g — средняя концентрация молекул поглощающего газа в единице объема; n_i — концентрация частиц пылевой фракции; F — интенсивность излучения; α , α_i — коэффициенты поглощения; T_g — температура газа; T_i — температура частиц пылевой фракции; s_i — радиус частицы; σ — постоянная Стефана-Больцмана; C_p — теплоемкость смеси при постоянном давлении; $\zeta_i = \frac{2m_i C_{DV} (\gamma - 1) T_g}{a p s_i^2 p_g c_i (\gamma + 1)}$ — время тепловой релаксации частицы в среде; m_i — масса частицы; C_{DV} — теплоемкость вещества частиц при постоянном объеме; γ — показатель адиабаты газовой смеси; a — коэффициент аккомодации; c_i — средняя тепловая скорость молекул газа; M_w — средняя молекулярная масса смеси; M_{wm} — молекулярная масса m -ой компоненты смеси; l — координата распространения лазерного излучения; c_i — средняя тепловая скорость молекул газа; Q — тепловой эффект реакции; R — число превращений в единицу времени.

Информация о выражениях для нахождения вектора диффузионного потока, скорости образования или расхода компонент газа, тензора вязких напряжений, энтальпии каждой фракции частиц, вектора потока тепла, коэффициентов поглощения, времени тепловой релаксации, средней тепловой скорости молекул газа, теплового эффекта реакции представлены в работе [1].

Химические процессы в нагретой среде рассчитываются по кинетической схеме связанных между собой гетерогенных и гомогенных радикально-цепных реакций, включающей 40 элементарных стадий и 15 компонент газовой смеси. Схема была создана для диапазона температур от 900 К до 1400 К [8]. Диаметр пучка лазерного излучения, его мощность и длительность являются параметрами, которые задаются в начальных и граничных условиях. Далее предполагаем использование непрерывного излучения CO₂-лазера, хотя могут изучаться режимы одиночного импульса и импульсно-периодического излучения для CO₂-лазера.

Представленная система уравнений дополняется начальными и граничными условиями. В качестве начальных условий принимаются концентрации газовых компонент Y_m^0 , концентрации частиц n_i^0 , температура газа T_g^0 , температура частиц T_i^0 , давление p^0 , скорость потока \vec{v}^0 . В качестве граничных условий рассматриваются условия втекания потока ($Y_m^{in}, n_i^{in}, T_g^{in}, T_i^{in}, p^{in}, \vec{v}^{in}$), условия вытекания p^{out} , условия прилипания ($T_g^{bound}, \vec{v} = 0$).

В рамках одного шага интегрирования по времени последовательно решаются уравнения химической кинетики (8) для учета вклада в компонентный состав химических реакций, уравнения для температуры частиц (7) и лазерного излучения (6); интегрируется система уравнений (1)–(4) без учета динамической составляющей давления и находятся значения плотности газовых компонент и наночастиц, суммарной энтальпии газа и частиц, предварительного вектора скорости. Из найденных значений выражаются температура газовой смеси, концентрации газовых компонент и наночастиц. На заключительном этапе решается уравнение Пуассона с использованием условия на дивергенцию вектора скорости (5) для нахождения динамической составляющей давления p и проводится коррекция вектора скорости.

Описанный вычислительный алгоритм был реализован на языке C++ с использованием технологии параллельных вычислений MPI. Самой трудоемкой операцией является этап расчета уравнений химической кинетики [9], поскольку приходится решать жесткую систему уравнений, включающую десятки компонент газовой смеси. Также трудоемким является этап решения уравнения Пуассона для динамической составляющей давления, где приходится решать СЛАУ, размерность которой зависит от расчетной сетки. Вычислительный алгоритм для отдельных уравнений был проверен на известных решениях. Вычислительный алгоритм был ранее протестирован в предельных случаях на аналитических решениях в модельных задачах течения Пуазейля, Куэтта и теплопроводности с химической реакцией (в плоском варианте), экспериментальных данных пиролиза этана. Сходимость численного метода проверена и подтверждена на последовательности сгущающихся сеток.

Результаты исследования

Входные и выходные потоки в расчетной области. Цилиндрическая форма расчетной области определена типичным видом реакторов в химических технологиях и хорошей изученностью течений по прямым трубам круглого сечения. Сечение пучка лазерного излучения в приближении геометрической оптики тоже часто представляет собой круг, радиус которого может меняться оптическими элементами. Соосное распространение лазерного пучка по круглой трубе легко осуществимо в лабораторных экспериментах. Для вычислительных экспериментов, целью которых является определение влияния лазерного излучения на встречный поток реагентов, такая конфигурация расчетной области вместе с излучением имеет свой интерес. Эта цель позволяет отказаться от расчета распределения потоков по азимутальному углу цилиндрической системы координат, что сводит задачу к двумерной постановке и существенно упрощает разработку вычислительного алгоритма. Основным ожидаемым результатом ввода лазерного излучения в реакционную среду является создание области повышенной температуры, которая является источником дополнительных радикалов вне этой области. Это существенно повысит реакционную способность системы на выходе потоков и позволит достичь более высоких значений конверсии метана при прочих равных условиях.

Расчетная область (рис. 1) представляет собой трубу цилиндрической формы общей длиной 600 мм и диаметром 20 мм. Область состоит из четырех зон от A до D . Зона A имеет пониженную температуру стенок и пред-

назначена для расчета ввода излучения. Она изолируется от основной реакционной зоны *C* кольцеобразным вводом *I* относительно холодного метана. В зоне *B* стенки подогревают метан до определенной температуры. Реакционная зона *C* составляет 330 мм и ограничена кольцеобразным вводом газопылевой смеси *3* и кольцеобразным выводом для продуктов реакции *2*. В зоне *D* формируется поток метана с наночастицами навстречу лазерному излучению. Такое расположение реакционной зоны необходимо для организации воздействия лазерного излучения на реагирующую смесь в области выхода продуктов реакции и предохранения от перегрева торцевых стенок трубы.

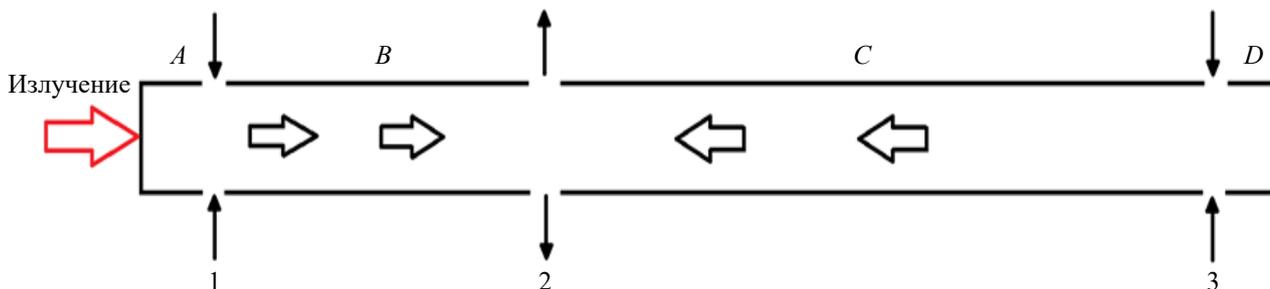


Рис. 1. Схема расчетной области с входными и выходными потоками

Начальные и граничные условия. В начальный момент времени область заполнена метаном температурой 973 К, давление 101,325 Па. На вводах *1* и *3* определены условия втекания потока с заданными постоянными расходом 10 л/ч (10 % со входа *1*, 90 % со входа *3*) и составом смеси. Через вводы *3* подается подогретая до 1173 К газопылевая смесь (метан и каталитические наночастицы с радиусом $5 \cdot 10^{-9}$ м, концентрацией $1.2 \cdot 10^{18}$ м⁻³). Энергия в реакционную зону вводится через стенки *B* и *C*, температура которых 1173 К. Двигаясь по реакционной зоне, газ и частицы прогреваются от стенок к центру. Через вводы *1* подается относительно холодный метан с температурой 573 К. При температуре стенок 1173 К он остается инертным и движется встречным потоком к газопылевой смеси. Смешение потоков и вывод продуктов реакции происходит у выхода *2*. Температура стенок в зонах *A* и *D* 573 К. Слева вдоль оси вводится излучение CO₂ лазера мощностью 30 Вт, диаметр луча 12 мм. Ширина кольцеобразных входов *1* и *3* — 5 мм, выхода *2* — 8 мм.

Описанная задача решается в цилиндрической системе координат для случая осесимметричного течения. В расчетах принимается 2D сетка прямоугольников, количество ячеек 6000, шаг по пространству $h = 10^{-3}$, по времени $\Delta t = 10^{-5}$.

Для выбранного размера и начальной концентрации наночастиц может происходить объединение частиц во фрактальные агломераты, но время этого процесса существенно превышает время нахождения наночастиц в зоне *C*. Кроме того, общая поверхность у фрактальных агломератов меняется слабо, так что сохраняется общая каталитическая поверхность, достаточная для конверсии метана. Для заданных параметров отношение длины теплопроводности по газу к радиусу трубы и отношение диффузионной длины атома водорода к радиусу больше 1. Это определяет прогрев среды в трубе. Заполнение атомом водорода всей смеси по радиусу обеспечивает протекание радикальных цепных реакций с метаном и вторичных углеводородов. Смешение относительно холодного встречного потока метана в зоне кольцеобразного выхода *2* и поглощения лазерного излучения дает возможность охлаждения на выходе газопылевой смеси.

Течение без подвода лазерного излучения. Рассмотрим течение двухфазной газопылевой смеси с химическими реакциями в представленной на рис. 1 осесимметричной трубе без подвода лазерного излучения. Конверсия метана является эндотермическим процессом, энергия для запуска реакций поступает в систему за счет непрерывного нагрева стенок области.

Встречные потоки подаваемой газопылевой смеси через кольцеобразный вход *3* на боковой поверхности трубы эффективно смешиваются, разворачиваются и формируют ламинарный поток вдоль оси (справа налево). На расстоянии одного калибра трубы от входа *3* под воздействием нагрева стенок скорость принимает свои максимальные значения 11 см/с (рис. 2). В этой же области происходит запуск процесса конверсии метана с компонентным перераспределением продуктов реакции. Наличие в продуктах водорода обуславливает существенное изменение объема среды с торможением потока, которое начинается на расстоянии двух калибров трубы от входа *3*. Падению скорости отвечает увеличение концентрации частиц во второй части реакционной зоны (ближе к выходу *2*). Наличие входа *1* также влияет на формирование газовых потоков, в результате чего подаваемый в эту область метан ограничивает область реакционной зоны. Газопылевой поток и поток метана смешиваются, образуя зону торможения в области выхода *2* (рис. 2).

Максимальная концентрация частиц, в 2 раза большая концентрации на входе *3*, наблюдается на выходе *2* (рис. 3). Температура смеси в реакционной зоне близка к температуре стенок (рис. 4), что иллюстрирует условие, при котором энергии, поступающей от стенок трубы, достаточно для прогрева всей области и проведения эндотермических химических реакций. Свою роль здесь также играет особая конструкция трубы — пониженные температуры

у торцевых стенок из-за газовой изоляции в этих областях обеспечивают защиту окон (для потенциальной подачи лазерного излучения) от нагревания.

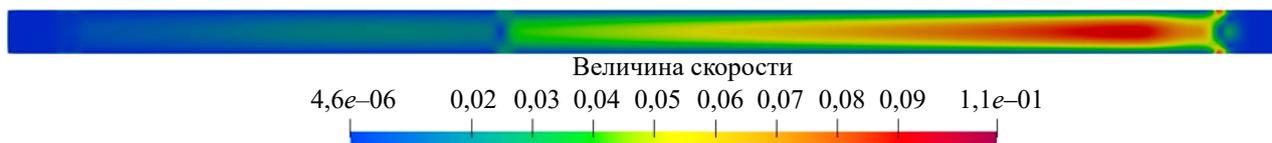


Рис. 2. Распределение скорости, м/с

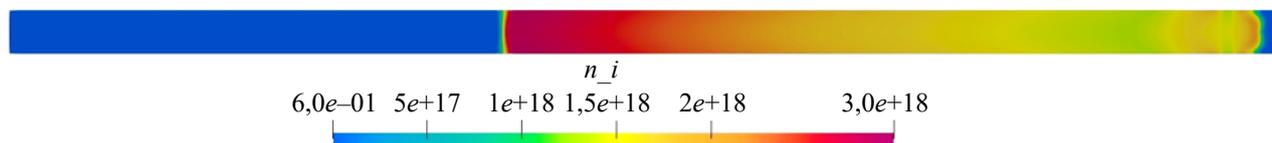


Рис. 3. Распределение наночастиц, м⁻³

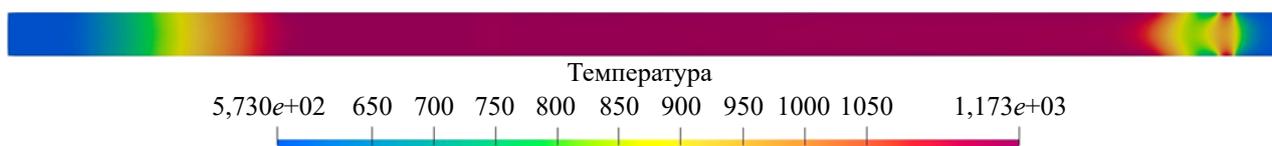


Рис. 4. Распределение температуры, К



Рис. 5. Распределение массовой доли метана

Химические реакции запускаются на расстоянии одного калибра трубы от входа 3 за счет нагрева стенок и протекают почти по всему объему реакционной зоны С с более активной конверсией метана (71 %) в области выхода 2. Максимальная конверсия метана наблюдается в этой области за счет накопления в ней наночастиц (рис. 3, 5), выступающих активными центрами химических реакций, и температуры смеси, приблизительно равной температуре стенок. По мере продвижения газопылевого потока происходит образование и накопление продуктов реакции с их максимальными концентрациями в области выходов 2. Из продуктов преимущественно образуются ароматические соединения — 31,5 %, этилен — 16,2 %, водород — 10,0 %. На выходе 2 конверсия метана составляет 65,0 %, поскольку происходит смешение реакционной смеси со встречным потоком метана (10 % поступает со входа 1, 90 % — со входа 3).

Воздействие лазерного излучения. Рассмотрим результаты расчета для химически активного двухфазного потока в присутствии лазерного излучения. Подвод луча мощности 30 Вт и диаметром 12 мм организован вдоль оси трубы через левый торец.

Лазерное излучение, поступающее в трубу слева, проходит через буферную зону, заполненную оптически прозрачным метаном, и поглощается в области вытекания потока наночастицами и этиленом (рис. 6).

Подвод энергии приводит к возникновению области повышенной температуры. Ее значения достигают 1364 К (рис. 7). Сдвиг повышенной температуры в буферную зону объясняется наличием диффузии поглощающего излучения этилена и водорода, теплопроводность которого в несколько раз превышает теплопроводность других компонент смеси. Несмотря на повышение температуры в этой области почти на 200 К по сравнению с расчетом без излучения скорость потока и, как следствие, концентрация частиц не меняют своих значений по объему трубы (рис. 8, 9). Поступающая энергия лазерного излучения с повышением температуры расходуется на эндотермические химические реакции.



Рис. 6. Распределение интенсивности излучения, Вт/м²

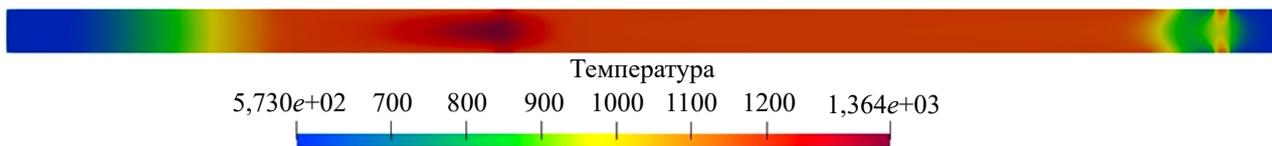


Рис. 7. Распределение температуры, К

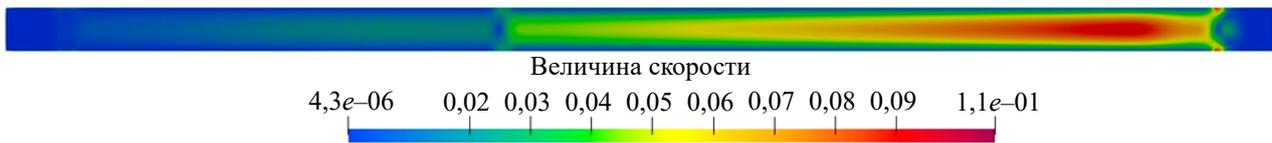


Рис. 8. Распределение скорости, м/с

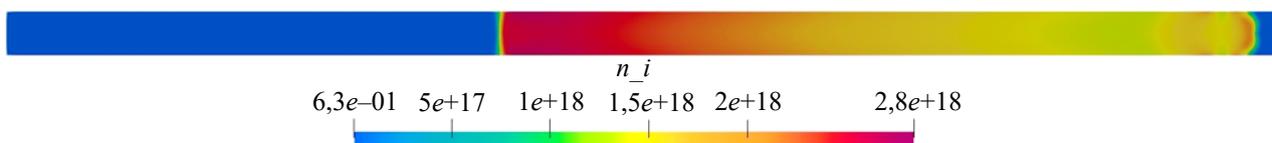


Рис. 9. Распределение наночастиц, м³

На рис. 10–12 приведены распределения основных компонент газовой смеси по трубе. По графикам видно, как и в случае отсутствия излучения, постепенное нарастание к выходу 2 продуктов реакции с конверсией метана 73 %. Однако, с подводом лазерного излучения происходит существенное перераспределение компонентного состава по трубе. Максимальные массовые доли водорода (рис. 11) и ароматических соединений (рис. 12) наблюдаются в области выхода 2, именно эти продукты образуются при температуре выше 1300 К, обеспеченной вводом лазерного излучения. Массовая доля этана в этой области стремительно снижается, поскольку при таких температурах происходит его пиролиз. Максимальная доля этилена 19 % наблюдается в центральной части реактора, к выходу она падает до 6 %. Появление около 5 % водорода в левой «защитной» области трубы объясняется его диффузией.



Рис. 10. Распределение массовой доли метана



Рис. 11. Распределение массовой доли водорода

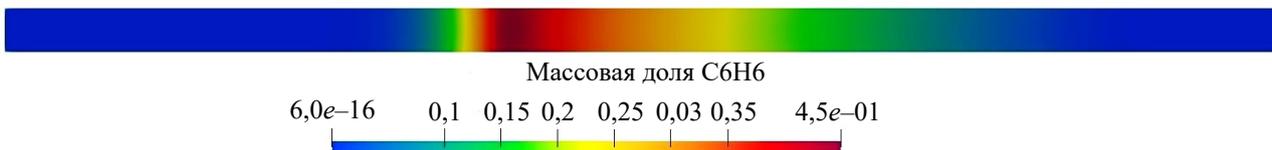


Рис. 12. Распределение массовой доли ароматических соединений

Поскольку на выходе из трубы происходит смешение встречных потоков метана, его наблюдаемая конверсия падает до 69,0 % со следующим распределением массовых долей целевых продуктов реакции: ароматические соединения — 44,0 %, этилен — 6,0 %, водород — 11,6 %.

Для исследования влияния параметров вычислительного эксперимента проведены расчеты для других значений температуры стенок реакционной зоны C от 1073 К до 1173 К при неизменных прочих начальных и граничных условиях. В присутствии лазерного излучения зависимость конверсии метана от температуры стенок носит линейный характер: с увеличением температуры смеси на 25 К добавочная конверсия метана составляет около 10 %, который

преимущественно преобразуется в ароматические соединения. Это связано с тем, что при достижении определенной температуры происходит сдвиг кинетики химических реакций в сторону образования этих соединений.

Обсуждение и заключение. Проведено математическое моделирование двухфазных химически активных газопылевых потоков с помощью программы собственной разработки. Программа предназначена для расчета в цилиндрических координатах осесимметрических дозвуковых течений с малым изменением давления. Численный алгоритм не накладывает ограничений на изменение скорости потока в расчетной области и на существенные изменения объема среды за счет химических реакций. Для изучения конверсии метана разработанная программа адаптирована для исследования течения в трубе со встречными потоками реагирующего газа и ИК-лазерного излучения. В серии вычислительных экспериментов в отсутствие излучения и с излучением 30 Вт изучено его воздействие на динамику химически активного встречного потока газопылевой смеси.

Как оказалось, ИК-лазерное излучение относительно небольшой мощности и интенсивности порядка 30 Вт/см², поглощаемое непосредственно в газе, оказывает сильное воздействие на встречный двухфазный поток наночастиц с многокомпонентным газом углеводородов. Это воздействие сводится к созданию области с более высокой температурой на выходе реакционной среды. Повышенные температуры и затраты тепловой мощности в присутствии излучения приводят к сдвигу продуктов конверсии метана в сторону увеличения выходов ароматических углеводородов. Повышение выходов ароматики достигается вложением лазерной энергии на самой последней стадии химического процесса. Закалка полученных продуктов осуществляется выводом реакционной смеси из под лазерного излучения. Численное моделирование динамики реакционных двухфазных сред представляет интерес для разработки теоретических основ переработки метана в ценные продукты. Полученные результаты естественным образом подтверждают вывод о необходимости совместного использования средств математического моделирования и лабораторных экспериментов для разработки новых ресурсосберегающих и экономически обоснованных технологий переработки природного газа.

Список литературы / References

1. Snytnikov V.N., Peskova E.E., Stoyanovskaya O.P. Mathematical Model of a Two-Temperature Medium of Gas–Solid Nanoparticles with Laser Methane Pyrolysis. *Mathematical Models and Computer Simulations*. 2023;15:877–893. <https://doi.org/10.1134/S2070048223050095>
2. Peskova E.E. Mathematical Modeling of Nonstationary Problems Related to Laser Thermochemistry of Methane in the Presence of Catalytic Nanoparticles. *Doklady Mathematics*. 2024;109(3):256–261. <https://doi.org/10.1134/S1064562424702107>
3. Пинаева Л.Г., Носков А.С., Пармон В.Н. Перспективы прямой каталитической переработки метана в востребованные химические продукты. Обзор. *Катализ в промышленности*. 2017;17(3):184–200. <https://doi.org/10.18412/1816-0387-2017-3-184-200>
4. Pinaeva L.G., Noskov A.S., Parmon V.N. Potentialities of the Direct Catalytic Processing of Methane into in-Demand Chemicals. Review. *Kataliz v promyshlennosti*. 2017;17(3):184–200. (In Russ.) <https://doi.org/10.18412/1816-0387-2017-3-184-200>
5. Guo X., Fang G., Li G. et al. Direct, Nonoxidative Conversion of Methane to Ethylene, Aromatics, and Hydrogen. *Science*. 2014;344(6184):616–619. <https://doi.org/10.1126/science.1253150>
6. Франк-Каменецкий Д.А. *Диффузия и теплопередача в химической кинетике*. Москва: Наука; 1967. 491 с.
7. Frank-Kamenetskii D.A. *Diffusion and Heat Transfer in Chemical Kinetics*. Plenum Press, New York; 1969. (In Russ.)
8. Day M.S., Bell J.B. Numerical simulation of laminar reacting flows with complex chemistry. *Combustion Theory and Modelling*. 2000;4(4):535–556.
9. Borisov V.E., Yakush S.E., Sysoeva E.Y. Numerical Simulation of Cellular Flame Propagation in Narrow Gaps. *Mathematical Models and Computer Simulations*. 2022;14:755–770. <https://doi.org/10.1134/S2070048222050039>
10. Lashina E.A., Peskova E.E., Snytnikov V.N. Mathematical modeling of the homogeneous-heterogeneous non-oxidative CH₄ conversion: the role of gas-phase H or CH₃. *Reaction Kinetics, Mechanisms and Catalysis*. 2023;136:1775–1789. <https://doi.org/10.1007/s11144-023-02442-8>
11. Hairer E., Wanner G. *Solving Ordinary Differential Equations II. Stiff and Differential-Algebraic Problems*. Springer-Verlag, Berlin; 1996.

Об авторах:

Елизавета Евгеньевна Пескова, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры прикладной математики, дифференциальных уравнений и теоретической механики Национального исследовательского Мордовского государственного университета им. Н.П. Огарёва (430005, Российская Федерация, г. Саранск, ул. Большевикская, 68), [ORCID](https://orcid.org/), [MathNet](https://mathnet.ru/), e.e.peskova@math.mrsu.ru

Валерий Николаевич Снытников, кандидат физико-математических наук, ведущий научный сотрудник, Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН (630090, Российская Федерация, г. Новосибирск, пр. Лаврентьева, 5), [ORCID](#), [MathNet](#), snyt@catalysis.ru

Заявленный вклад авторов:

Е.Е. Пескова: разработка методов исследования, проведение численных расчетов, визуализация и анализ результатов.

В.Н. Снытников: постановка задачи, разработка методов исследования, анализ результатов.

Конфликт интересов: авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Все авторы прочитали и одобрили окончательный вариант рукописи.

About the Authors:

Elizaveta E. Peskova, Associate professor, Department of Applied Mathematics, Differential Equations and Theoretical Mechanics, National Research Mordovia State University (68/1, Bolshevistskaya St., Saransk, Russian Federation, 430005), [ORCID](#), [MathNet](#), e.e.peskova@math.mrsu.ru

Valeriy N. Snytnikov, Leading Researcher, Boreskov Institute of Catalysis SB RAS (5, Lavrentiev Av., Novosibirsk, Russian Federation, 630090), [ORCID](#), [MathNet](#), snyt@catalysis.ru

Claimed Contributorship:

Е.Е. Пескова: development of research methods, numerical calculations, visualization and analysis of results.

V.N. Snytnikov: problem statement, development of research methods, analysis of results.

Conflict of Interest Statement: the authors declare no conflict of interest.

All authors have read and approved the final manuscript.

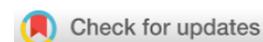
Поступила в редакцию / Received 05.08.2024

Поступила после рецензирования / Reviewed 19.08.2024

Принята к публикации / Accepted 26.08.2024

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ МАТЕМАТИКА

COMPUTATIONAL MATHEMATICS



УДК 519.6

Оригинальное теоретическое исследование

<https://doi.org/10.23947/2587-8999-2024-8-3-43-59>


Построение разностных схем второго порядка точности для задач диффузии-конвекции мультифракционных взвесей в прибрежных морских системах

В.В. Сидорякина^{1,2} ¹ Донской государственный технический университет, г. Ростов-на-Дону, Российская Федерация² Таганрогский институт имени А.П. Чехова (филиал) РГЭУ (РИНХ), г. Таганрог, Российская Федерация✉ cvv9@mail.ru**Аннотация**

Введение. Рассматривается начально-краевая задача транспорта мультифракционных взвесей применительно к прибрежным морским системам. Данная задача описывает процессы переноса и осаждения частиц взвеси, а также взаимный переход между её различными фракциями. С целью получения монотонных разностных схем для задач диффузии-конвекции взвесей целесообразно использовать разностные схемы, удовлетворяющие принципу максимума. При построении разностной схемы, для которой будет выполнен принцип максимума, желательно получить второй порядок аппроксимации по пространственной переменной как для внутренних, так и для граничных точек исследуемой области.

Материалы и методы. Данная задача вызывает определенные трудности при рассмотрении границ геометрической области, для которых выполнены граничные условия второго и третьего рода. В этих случаях, чтобы сохранить второй порядок погрешности аппроксимации, вводится «расширенная» сетка (сетка, дополненная фиктивными узлами). Ориентиром служит аппроксимация указанных граничных условий по формуле центральных разностей и исключение из полученных выражений функций концентрации взвеси в фиктивном узле.

Результаты исследования. Построены разностные схемы второго порядка точности для задачи диффузии-конвекции мультифракционных взвесей в прибрежных морских системах.

Обсуждение и заключение. Предложенные схемы не являются абсолютно стабильными и подробный анализ устойчивости и сходимости, связанный с отношением шагов сетки, является важной проблемой, которую автор планирует решать в будущем.

Ключевые слова: прибрежные морские системы, мультифракционная взвесь, задача диффузии-конвекции, разностная схема, погрешность аппроксимации

Финансирование. Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23–21–00509, <https://rscf.ru/project/23-21-00509>

Для цитирования. Сидорякина В.В. Построение разностных схем второго порядка точности для задач диффузии-конвекции мультифракционных взвесей в прибрежных морских системах. *Computational Mathematics and Information Technologies*. 2024;8(3):43–59. <https://doi.org/10.23947/2587-8999-2024-8-3-43-59>

Original Theoretical Research

Construction of Second-Order Finite Difference Schemes for Diffusion-Convection Problems of Multifractional Suspensions in Coastal Marine Systems

Valentina V. Sidoryakina^{1,2} ¹ Don State Technical University, 1, Gagarin Sq., Rostov-on-Don, Russian Federation² Taganrog Institute named after A.P. Chekhov (branch) of RSUE, Taganrog, Russian Federation✉ cvv9@mail.ru**Abstract**

Introduction. This paper addresses an initial-boundary value problem for the transport of multifractional suspensions applied to coastal marine systems. This problem describes the processes of transport, deposition of suspension particles,

and the transitions between its various fractions. To obtain monotonic finite difference schemes for diffusion-convection problems of suspensions, it is advisable to use schemes that satisfy the maximum principle. When constructing a finite difference scheme that adheres to the maximum principle, it is desirable to achieve second-order spatial accuracy for both interior and boundary points of the domain under study.

Materials and Methods. This problem presents certain difficulties when considering the boundaries of the geometric domain, where boundary conditions of the second and third kinds are applied. In these cases, to maintain second-order approximation accuracy, an “extended” grid is introduced (a grid supplemented with fictitious nodes). The guideline is the approximation of the given boundary conditions using the central difference formula, with the exclusion of the concentration function at the fictitious node from the resulting expressions.

Results. Second-order accurate finite difference schemes for the diffusion-convection problem of multifractional suspensions in coastal marine systems are constructed.

Discussion and Conclusion. The proposed schemes are not absolutely stable, and a detailed analysis of stability and convergence, particularly concerning the grid step ratio, remains an important problem that the author plans to address in the future.

Keywords: coastal marine systems, multifractional suspension, diffusion-convection problem, difference scheme, approximation error

Funding information. The study was supported by the Russian Science Foundation grant no. 23–21–00509, <https://rscf.ru/project/23-21-00509>

For citation. Sidoryakina V.V. Construction of Second-Order Finite Difference Schemes for Diffusion-Convection Problems of Multifract Suspensions in Coastal Marine Systems. *Computational Mathematics and Information Technologies*. 2024;8(3):43–59. <https://doi.org/10.23947/2587-8999-2024-8-3-43-59>

Введение. Взвешенное вещество (взвесь) является естественной частью морских систем. Изменения количественного и качественного состава взвеси могут структурировать ландшафт, негативно влиять на экологические сообщества и сократить срок службы инфраструктуры. Для решения данных проблем необходимо четкое понимание процессов транспортировки взвеси с учетом пространственных и временных изменений. Как правило, для этих целей прибегают к методам математического и численного моделирования [1–4].

В рамках данной статьи читателю предлагается ознакомиться с математической моделью транспортировки взвеси, основанной на трехмерном уравнении диффузии-конвекции. В ней учитываются многофракционный состав взвеси, скорость водного потока, гидравлическая крупность, сложная геометрия дна, ветровые напряжения, трение о дно и т. д. [5–8]. Особое внимание уделено аппроксимации предложенной модели во внутренних и граничных точках расчетной области. Предложенные методы позволяют построить разностную схему, аппроксимирующую рассматриваемую модель со вторым порядком точности относительно шагов пространственной сетки с учетом граничных условий второго и третьего рода.

Материалы и методы

1. Постановка задачи диффузии-конвекции мультифракционных взвесей. В прямоугольной декартовой системе координат $Oxyz$ рассмотрим трехмерное уравнение диффузии-конвекции с использованием кососимметрической формы представления оператора конвективного переноса [5–7]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_r}{\partial t} + C_0 c_r &= D c_r + F_r, \quad r=1,2,3, \quad (x,y,z) \in \bar{G}, \quad \bar{G} = \{0 \leq x \leq L_x, 0 \leq y \leq L_y, 0 \leq z \leq L_z\}; \\ C_0 c_r &\equiv \frac{1}{2} \left[u \frac{\partial c_r}{\partial x} + v \frac{\partial c_r}{\partial y} + w \frac{\partial c_r}{\partial z} + w'_r \frac{\partial (u c_r)}{\partial x} + \frac{\partial (v c_r)}{\partial y} + \frac{\partial (w'_r c_r)}{\partial z} \right], \\ D c_r &= \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu_{h,r} \frac{\partial c_r}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu_{h,r} \frac{\partial c_r}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_{v,r} \frac{\partial c_r}{\partial z} \right), \\ F_1 &= (\alpha_2 c_2(x,y,z,t) - \beta_1 c_1) + \gamma_1 c_1, \\ F_2 &= (\beta_1 c_1(x,y,z,t) - \alpha_2 c_2) + (\alpha_3 c_3(x,y,z,t) - \beta_2 c_2) + \gamma_2 c_2, \\ F_3 &= (\beta_2 c_2(x,y,z,t) - \alpha_3 c_3) + \gamma_3 c_3, \end{aligned} \quad (1)$$

где c_r , $c_r = c_r(x,y,z,t)$ — концентрация частиц в момент времени t , $t \in [0; T]$; u, v, w — компоненты вектора \vec{U} скорости водной среды; $w'_r, w'_r = w + w_{g,r}$ — гидравлическая крупность частиц; $\mu_{h,r}, \mu_{v,r}$ — коэффициенты горизонтальной и вертикальной диффузии частиц; F_r — функция источника; α_r, β_r — коэффициенты, описывающие интенсивность превращения частиц одной фракции в другую, $\alpha_r \geq 0, \beta_r \geq 0$; γ_r — мощность внешнего источника частиц. Здесь нижний индекс r указывает на принадлежность частицы к фракции под номером r .

Уравнение (1) дополняется начальными условиями:

$$c_r(x,y,z,0) = c_{r,0}(x,y,z), \quad (x,y,z) \in \bar{G}; \quad (2)$$

и граничными условиями:

– на боковых гранях параллелепипеда G :

$$c_r = c'_r, \text{ если } u_n < 0; \tag{3}$$

$$\frac{\partial c_r}{\partial \vec{n}} = 0, \text{ если } u_n \geq 0; \tag{4}$$

(u_n — проекция вектора скорости на внешнюю нормаль \vec{n} к границе, c'_r известные значения концентраций);

– на верхнем основании параллелепипеда G :

$$\frac{\partial c_r}{\partial z} = 0; \tag{5}$$

– на нижнем основании параллелепипеда G :

$$\frac{\partial c_r}{\partial z} = -\varepsilon_r c_r. \tag{6}$$

Методами, изложенными в работе [9], выполнено преобразование с «запаздыванием» на временной сетке $\bar{\omega}_t = \{t_n = n\tau, n=0,1,\dots,N_t, N_t\tau=T\}$ и переход к новой системе координат $Ox\theta$, $\theta \in [0;1]$ по формулам:

$$\theta = \frac{z-\eta}{h}, x_\theta = x, y_\theta = y, \tag{7}$$

где h — глубина; η — высота свободной поверхности относительно свободной поверхности) [10].

Уравнение (1) преобразуется следующим образом:

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_r^n}{\partial t} + C_0 c_r^n &= D c_r^n + F_r^n, r=1,2,3, t_{n-1} < t \leq t_n, n=1,2,\dots,N_t, \\ C_0 c_r^n &\equiv \frac{1}{2} \left[u \frac{\partial c_r^n}{\partial x} + v \frac{\partial c_r^n}{\partial y} + w'_r \frac{1}{H} \frac{\partial c_r^n}{\partial \theta} + \frac{\partial(u c_r^n)}{\partial x} + \frac{\partial(v c_r^n)}{\partial y} + \frac{1}{H} \frac{\partial(w'_r c_r^n)}{\partial \theta} \right], \\ D c_r^n &= \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu_{h,r} \frac{\partial c_r^n}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu_{h,r} \frac{\partial c_r^n}{\partial y} \right) + \frac{1}{H^2} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\mu_{v,r} \frac{\partial c_r^n}{\partial \theta} \right), \\ F_1^n &= (\alpha_2 c_2^{n-1}(x,y,\theta,t_{n-1}) - \beta_1 c_1^n) + \gamma_1^n c_1^n, \\ F_2^n &= (\beta_1 c_1^{n-1}(x,y,\theta,t_{n-1}) - \alpha_2 c_2^n) + (\alpha_3 c_3^{n-1}(x,y,\theta,t_{n-1}) - \beta_2 c_2^n) + \gamma_2^n c_2^n, \\ F_3^n &= (\beta_2 c_2^{n-1}(x,y,\theta,t_{n-1}) - \alpha_3 c_3^n) + \gamma_3^n c_3^n. \end{aligned} \tag{8}$$

Начальные и граничные условия (2)–(6) соответствующим образом примут вид:

$$c_r^1(x,y,\theta,0) = c_{r,0}, (x,y,\theta) \in \bar{G}, \tag{9}$$

$$c_r^n(x,y,\theta,t_{n-1}) = c_r^{n-1}(x,y,\theta,t_{n-1}), n=2,\dots,N_t, (x,y,\theta) \in G;$$

$$c_r^n = c'_r, \text{ если } u_n < 0; \tag{10}$$

$$\frac{\partial c_r^n}{\partial \vec{n}} = 0, \text{ если } u_n \geq 0, \tag{11}$$

$$\frac{\partial c_r^n}{\partial \theta} = 0; \tag{12}$$

$$\frac{\partial c_r^n}{\partial \theta} = -\varepsilon_r c_r^n. \tag{13}$$

2. Разностная схема второго порядка точности для задачи диффузии-конвекции мультифракционных взвесей во внутренних узлах. Предположим существование непрерывных (ограниченных) частных производных четвертого порядка относительно пространственных переменных (x, y, θ) для функций c_r^n , $r=1,2,3$ и непрерывных

частных производных второго порядка относительно временной переменной t , то есть $\frac{\partial^4 c_r^n}{\partial x^4}, \frac{\partial^4 c_r^n}{\partial y^4}, \frac{\partial^4 c_r^n}{\partial \theta^4}, \frac{\partial^2 c_r^n}{\partial t^2}$ —

непрерывные и, следовательно, ограниченные функции для всех $(x,y,\theta) \in \bar{G}, t_{n-1} \leq t \leq t_n, n=1,\dots,N_t$. Также предпо-

ложим непрерывности частных производных второго порядка: $\frac{\partial^2 \mu_{h,r}}{\partial x^2}, \frac{\partial^2 \mu_{h,r}}{\partial y^2}, \frac{\partial^2 \mu_{v,r}}{\partial \theta^2}, \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \frac{\partial^2 v}{\partial y^2}, \frac{\partial^2 w'_r}{\partial \theta^2}$.

Для аппроксимации задачи (8)–(13) используем сетки:

$$\begin{aligned}\omega &= \omega_x \times \omega_y \times \omega_\theta, \quad \bar{\omega} = \bar{\omega}_x \times \bar{\omega}_y \times \bar{\omega}_\theta, \\ \omega_x &= \{x: x = ih_x; i = 1, \dots, N_x - 1; (N_x - 1)h_x \equiv L_x - h_x\}, \\ \omega_y &= \{y: y = jh_y; j = 1, \dots, N_y - 1; (N_y - 1)h_y \equiv L_y - h_y\}, \\ \omega_\theta &= \{\theta: \theta = kh_\theta; k = 1, \dots, N_\theta - 1; (N_\theta - 1)h_\theta \equiv 1 - h_\theta\}, \\ \bar{\omega}_x &= \{x: x = ih_x; i = 0, 1, \dots, N_x; N_x h_x \equiv L_x\}, \\ \bar{\omega}_y &= \{y: y = jh_y; j = 0, 1, \dots, N_y; N_y h_y \equiv L_y\}, \\ \bar{\omega}_\theta &= \{\theta: \theta = kh_\theta; k = 0, 1, \dots, N_\theta; N_\theta h_\theta \equiv 1\}.\end{aligned}$$

Далее при записи сеточных функций для c_r^n и F_r^n будет использоваться черта над ними. После введенных предположений приходим к аппроксимации уравнения (8):

$$\begin{aligned}\frac{\bar{c}_r^n(x_i, y_j, \theta_k) - \bar{c}_r^{n-1}(x_i, y_j, \theta_k)}{\tau} + C_0 \bar{c}_r^n &= D \bar{c}_r^n + \bar{F}_r^n, \quad r = 1, 2, 3, \quad (x_i, y_j, \theta_k) \in \omega, \quad t_n \in \bar{\omega}_\tau, \\ C_0 \bar{c}_r^n &= \frac{1}{2h_x} (u^n(x_i + 0, 5h_x, y_j, \theta_k) \bar{c}_r^n(x_i + h_x, y_j, \theta_k) - u^n(x_i - 0, 5h_x, y_j, \theta_k) \bar{c}_r^n(x_i - h_x, y_j, \theta_k)) + \\ &+ \frac{1}{2h_y} (v^n(x_i, y_j + 0, 5h_y, \theta_k) \bar{c}_r^n(x_i, y_j + h_y, \theta_k) - v^n(x_i, y_j - 0, 5h_y, \theta_k) \bar{c}_r^n(x_i, y_j - h_y, \theta_k)) + \\ &+ \frac{1}{2H(x, y)h_\theta} (w_r^n(x_i, y_j, \theta_k + 0, 5h_\theta) \bar{c}_r^n(x_i, y_j, \theta_k + h_\theta) - w_r^n(x_i, y_j, \theta_k - 0, 5h_\theta) \bar{c}_r^n(x_i, y_j, \theta_k - h_\theta)), \\ D \bar{c}_r^n &= \frac{1}{h_x^2} (\mu_{h_x}(x_i + 0, 5h_x, y_j, \theta_k) (\bar{c}_r^n(x_i + h_x, y_j, \theta_k) - \bar{c}_r^n(x_i, y_j, \theta_k)) - \mu_{h_x}(x_i - 0, 5h_x, y_j, \theta_k) \cdot \\ &\cdot (\bar{c}_r^n(x_i, y_j, \theta_k) - \bar{c}_r^n(x_i - h_x, y_j, \theta_k))) + \frac{1}{h_y^2} (\mu_{h_y}(x_i, y_j + 0, 5h_y, \theta_k) (\bar{c}_r^n(x_i, y_j + h_y, \theta_k) - \bar{c}_r^n(x_i, y_j, \theta_k)) - \\ &- \mu_{h_y}(x_i, y_j - 0, 5h_y, \theta_k) (\bar{c}_r^n(x_i, y_j, \theta_k) - \bar{c}_r^n(x_i, y_j - h_y, \theta_k))) + \frac{1}{H^2(x_i, y_j)h_\theta^2} (\mu_{v,r}(x_i, y_j, \theta_k + 0, 5h_\theta) \cdot \\ &\cdot (\bar{c}_r^n(x_i, y_j, \theta_k + h_\theta) - \bar{c}_r^n(x_i, y_j, \theta_k)) - \mu_{v,r}(x_i, y_j, \theta_k - 0, 5h_\theta) (\bar{c}_r^n(x_i, y_j, \theta_k) - \bar{c}_r^n(x_i, y_j, \theta_k - h_\theta))), \\ \bar{F}_1^n &= (\alpha_2 \bar{c}_2^{n-1}(x, y, \theta, t_{n-1}) - \beta_1 \bar{c}_1^n) + \gamma_1^n \bar{c}_1^n, \\ \bar{F}_2^n &= (\beta_1 \bar{c}_1^{n-1}(x, y, \theta, t_{n-1}) - \alpha_2 \bar{c}_2^n) + (\alpha_3 \bar{c}_3^{n-1}(x, y, \theta, t_{n-1}) - \beta_2 \bar{c}_2^n) + \gamma_2^n \bar{c}_2^n, \\ \bar{F}_3^n &= (\beta_2 \bar{c}_2^{n-1}(x, y, \theta, t_{n-1}) - \alpha_3 \bar{c}_3^n) + \gamma_3^n \bar{c}_3^n.\end{aligned}\tag{14}$$

Убедимся в том, что разностная схема (14) имеет второй порядок точности. С этой целью в уравнение (14) подставим точное решение $c_r^n(x_i, y_j, \theta_k) \equiv c_r(x_i, y_j, \theta_k, t_n)$, $(x_i, y_j, \theta_k) \in G$, $t_n \in \omega_\tau$, $n = 0, 1, \dots, N_t$ задачи (3)–(8) и покажем, что для погрешности аппроксимации

$$\psi^n(x_i, y_j, \theta_k) = -\frac{c_r^n(x_i, y_j, \theta_k) - c_r^{n-1}(x_i, y_j, \theta_k)}{\tau} - C_0 c_r^n(x_i, y_j, \theta_k) + D c_r^n(x_i, y_j, \theta_k) + F_r^n(x_i, y_j, \theta_k)\tag{15}$$

выполнено соотношение:

$$\psi^n(x_i, y_j, \theta_k) = O(\tau + h^2), \quad n = 0, 1, \dots, N_t,\tag{16}$$

где $h^2 = h_x^2 + h_y^2 + h_\theta^2$.

Представим разложение функции c_r^{n-1} в ряд Тейлора относительно узла $(x_i, y_j, \theta_k, t_n)$:

$$c_r^{n-1}(x_i, y_j, \theta_k, t_{n-1}) = c_r^n(x_i, y_j, \theta_k, t_n) - \frac{\partial c_r^n(x_i, y_j, \theta_k, t_n)}{\partial t} \tau + \frac{\partial^2 c_r^n(x_i, y_j, \theta_k, t_n)}{\partial t^2} \frac{\tau^2}{2} + O(\tau^3).\tag{17}$$

С использованием соотношения (17) для первого слагаемого из левой части (15), находим:

$$\frac{c_r^n(x_i, y_j, \theta_k, t_n) - c_r^{n-1}(x_i, y_j, \theta_k, t_{n-1})}{\tau} = \frac{1}{\tau} \left[c_r^n(x_i, y_j, \theta_k, t_n) - \left(c_r^n(x_i, y_j, \theta_k, t_n) - \frac{\partial c_r^n(x_i, y_j, \theta_k, t_n)}{\partial t} \tau + \frac{\partial^2 c_r^n(x_i, y_j, \theta_k, t_n)}{\partial t^2} \frac{\tau^2}{2} + O(\tau^3) \right) \right] = \frac{\partial c_r^n(x_i, y_j, \theta_k, t_n)}{\partial t} + O(\tau). \quad (18)$$

Для оценки погрешности аппроксимации оператора конвективного переноса из уравнения (15) используются разложения c_r^n, u^n, v^n, w_r^n в ряд Тейлора в окрестности узла $(x_i, y_j, \theta_k, t_n)$:

$$c_r^n(x_i \pm h_x, y_j, \theta_k) = c_r^n(x_i, y_j, \theta_k) \pm \frac{\partial c_r^n(x_i, y_j, \theta_k)}{\partial x} h_x + \frac{\partial^2 c_r^n(x_i, y_j, \theta_k)}{\partial x^2} \frac{h_x^2}{2} + O(h_x^3), \quad (19)$$

$$c_r^n(x_i, y_j \pm h_y, \theta_k) = c_r^n(x_i, y_j, \theta_k) \pm \frac{\partial c_r^n(x_i, y_j, \theta_k)}{\partial y} h_y + \frac{\partial^2 c_r^n(x_i, y_j, \theta_k)}{\partial y^2} \frac{h_y^2}{2} + O(h_y^3), \quad (20)$$

$$c_r^n(x_i, y_j, \theta_k \pm h_\theta) = c_r^n(x_i, y_j, \theta_k) \pm \frac{\partial c_r^n(x_i, y_j, \theta_k)}{\partial \theta} h_\theta + \frac{\partial^2 c_r^n(x_i, y_j, \theta_k)}{\partial \theta^2} \frac{h_\theta^2}{2} + O(h_\theta^3), \quad (21)$$

$$u^n(x_i + 0,5h_x, y_j, \theta_k) + u^n(x_i - 0,5h_x, y_j, \theta_k) = 2u^n(x_i, y_j, \theta_k) + O(h_x^2), \quad (22)$$

$$u^n(x_i + 0,5h_x, y_j, \theta_k) - u^n(x_i - 0,5h_x, y_j, \theta_k) = \frac{\partial u^n(x_i, y_j, \theta_k)}{\partial x} h_x + O(h_x^3), \quad (23)$$

$$v^n(x_i, y_j + 0,5h_y, \theta_k) + v^n(x_i, y_j - 0,5h_y, \theta_k) = 2v^n(x_i, y_j, \theta_k) + O(h_y^2), \quad (24)$$

$$v^n(x_i, y_j + 0,5h_y, \theta_k) - v^n(x_i, y_j - 0,5h_y, \theta_k) = \frac{\partial v^n(x_i, y_j, \theta_k)}{\partial y} h_y + O(h_y^3), \quad (25)$$

$$w_r^n(x_i, y_j, \theta_k + 0,5h_\theta) + w_r^n(x_i, y_j, \theta_k - 0,5h_\theta) = 2w_r^n(x_i, y_j, \theta_k) + O(h_\theta^2), \quad (26)$$

$$w_r^n(x_i, y_j, \theta_k + 0,5h_\theta) - w_r^n(x_i, y_j, \theta_k - 0,5h_\theta) = \frac{\partial w_r^n(x_i, y_j, \theta_k)}{\partial \theta} h_\theta + O(h_\theta^3). \quad (27)$$

При подстановке в выражение (15) для $C_0 c_r^n$ соответствующих выражений (19)–(27), получаем:

$$C_0 c_r^n = \frac{1}{2} \frac{\partial u^n(x_i, y_j, \theta_k)}{\partial x} c_r^n(x_i, y_j, \theta_k) + u^n \frac{\partial c_r^n(x_i, y_j, \theta_k)}{\partial x} + \frac{1}{2} \frac{\partial v^n(x_i, y_j, \theta_k)}{\partial y} c_r^n(x_i, y_j, \theta_k) + v^n(x_i, y_j, \theta_k) \cdot \frac{\partial c_r^n(x_i, y_j, \theta_k)}{\partial y} + \frac{1}{2H(x_i, y_j)} \frac{\partial w_r^n(x_i, y_j, \theta_k)}{\partial \theta} c_r^n(x_i, y_j, \theta_k) + \frac{1}{H(x_i, y_j)} w_r^n(x_i, y_j, \theta_k) \frac{\partial c_r^n(x_i, y_j, \theta_k)}{\partial \theta} + O(h_x^2 + h_y^2 + h_\theta^2). \quad (28)$$

Для оценки погрешности аппроксимации оператора диффузионного переноса из уравнения (15) используются разложения $c_r^n, \mu_{h,r}, \mu_{v,r}$ в ряд Тейлора в окрестности точки (x_i, y_j, θ_k) :

$$c_r^n(x_i \pm h_x, y_j, \theta_k) = c_r^n(x_i, y_j, \theta_k) \pm \frac{\partial c_r^n(x_i, y_j, \theta_k)}{\partial x} h_x + \frac{\partial^2 c_r^n(x_i, y_j, \theta_k)}{\partial x^2} \frac{h_x^2}{2} \pm \frac{\partial^3 c_r^n(x_i, y_j, \theta_k)}{\partial x^3} \frac{h_x^3}{6} + O(h_x^4), \quad (29)$$

$$c_r^n(x_i, y_j \pm h_y, \theta_k) = c_r^n(x_i, y_j, \theta_k) \pm \frac{\partial c_r^n(x_i, y_j, \theta_k)}{\partial y} h_y + \frac{\partial^2 c_r^n(x_i, y_j, \theta_k)}{\partial y^2} \frac{h_y^2}{2} \pm \frac{\partial^3 c_r^n(x_i, y_j, \theta_k)}{\partial y^3} \frac{h_y^3}{6} + O(h_y^4), \quad (30)$$

$$c_r^n(x_i, y_j, \theta_k \pm h_\theta) = c_r^n(x_i, y_j, \theta_k) \pm \frac{\partial c_r^n(x_i, y_j, \theta_k)}{\partial \theta} h_\theta + \frac{\partial^2 c_r^n(x_i, y_j, \theta_k)}{\partial \theta^2} \frac{h_\theta^2}{2} \pm \frac{\partial^3 c_r^n(x_i, y_j, \theta_k)}{\partial \theta^3} \frac{h_\theta^3}{6} + O(h_\theta^4), \quad (31)$$

$$\mu_{h,r}(x_i + 0,5h_x, y_j, \theta_k) + \mu_{h,r}(x_i - 0,5h_x, y_j, \theta_k) = 2\mu_{h,r}(x_i, y_j, \theta_k) + O(h_x^2), \quad (32)$$

$$\mu_{h,r}(x_i + 0,5h_x, y_j, \theta_k) - \mu_{h,r}(x_i - 0,5h_x, y_j, \theta_k) = \frac{\partial \mu_{h,r}(x_i, y_j, \theta_k)}{\partial x} h_x + O(h_x^3), \quad (33)$$

$$\mu_{h,r}(x_i, y_j + 0,5h_y, \theta_k) + \mu_{h,r}(x_i, y_j - 0,5h_y, \theta_k) = 2\mu_{h,r}(x_i, y_j, \theta_k) + O(h_y^2), \quad (34)$$

$$\mu_{h,r}(x_i, y_j + 0,5h_y, \theta_k) - \mu_{h,r}(x_i, y_j - 0,5h_y, \theta_k) = \frac{\partial \mu_{h,r}(x_i, y_j, \theta_k)}{\partial y} h_y + O(h_y^3), \quad (35)$$

$$\mu_{v,r}(x_i, y_j, \theta_k + 0,5h_\theta) + \mu_{v,r}(x_i, y_j, \theta_k - 0,5h_\theta) = 2\mu_{v,r}(x_i, y_j, \theta_k) + O(h_\theta^2), \quad (36)$$

$$\mu_{v,r}(x_i, y_j, \theta_k + 0,5h_\theta) - \mu_{v,r}(x_i, y_j, \theta_k - 0,5h_\theta) = \frac{\partial \mu_{v,r}(x_i, y_j, \theta_k)}{\partial \theta} h_\theta + O(h_\theta^3). \quad (37)$$

При подстановке в выражение для Dc_r^n соответствующих выражений из равенств (29)–(37), получаем:

$$\begin{aligned} Dc_r^n = & \frac{\partial \mu_{h,r}(x_i, y_j, \theta_k) \partial c_r^n(x_i, y_j, \theta_k)}{\partial x} + \mu_{h,r}(x_i, y_j, \theta_k) \frac{\partial^2 c_r^n(x_i, y_j, \theta_k)}{\partial x^2} + \frac{\partial \mu_{h,r}(x_i, y_j, \theta_k) \partial c_r^n(x_i, y_j, \theta_k)}{\partial y} + \\ & + \mu_{h,r}(x_i, y_j, \theta_k) \frac{\partial^2 c_r^n(x_i, y_j, \theta_k)}{\partial y^2} + \frac{1}{H^2(x_i, y_j)} \left(\frac{\partial \mu_{h,r}(x_i, y_j, \theta_k) \partial c_r^n(x_i, y_j, \theta_k)}{\partial \theta} + \mu_{h,r}(x_i, y_j, \theta_k) \cdot \right. \\ & \left. \frac{\partial^2 c_r^n(x_i, y_j, \theta_k)}{\partial \theta^2} \right) + O(h_x^2 + h_y^2 + h_\theta^2). \end{aligned} \quad (38)$$

Из равенств (18), (28) и (38) следует, что общий порядок погрешности аппроксимации разностной схемы (14) в узлах сетки $\bar{\omega}_\tau \times \omega$ равен $O(\tau + h^2)$, $h^2 = h_x^2 + h_y^2 + h_\theta^2$.

Отметим, что начальное условие (9) задаётся на сетке $\bar{\omega}_\tau \times \omega$ точно.

3. Разностная схема второго порядка точности для задачи диффузии-конвекции мультифракционных взвесей в граничных узлах. Будем предполагать существование и непрерывность производных

$$\frac{\partial^4 c_r^n}{\partial x^4}, \frac{\partial^4 c_r^n}{\partial y^4}, \frac{\partial^4 c_r^n}{\partial \theta^4}, \frac{\partial^2 c_r^n}{\partial t^2}, \quad r = 1, 2, 3, \text{ а также непрерывности частных производных второго порядка: } \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \frac{\partial^2 v}{\partial y^2}, \frac{\partial^2 w_r'}{\partial \theta^2},$$

$$\frac{\partial^2 \mu_{h,r}}{\partial x^2}, \frac{\partial^2 \mu_{h,r}}{\partial y^2}, \frac{\partial^2 \mu_{v,r}}{\partial \theta^2}.$$

Дополнительно считаем, что существуют и непрерывны смешанные частные производные:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial^2 c_r^n}{\partial x \partial t}, \frac{\partial^2 c_r^n}{\partial y \partial t}, \frac{\partial^2 c_r^n}{\partial \theta \partial t}, \frac{\partial^4 c_r^n}{\partial t \partial x^3}, \frac{\partial^4 c_r^n}{\partial t \partial y^3}, \frac{\partial^4 c_r^n}{\partial t \partial \theta^3}, \frac{\partial^4 c_r^n}{\partial y \partial x^3}, \frac{\partial^4 c_r^n}{\partial \theta \partial x^3}, \frac{\partial^4 c_r^n}{\partial x \partial y^3}, \frac{\partial^4 c_r^n}{\partial \theta \partial y^3}, \frac{\partial^4 c_r^n}{\partial x \partial \theta^3}, \frac{\partial^4 c_r^n}{\partial y \partial \theta^3}, \\ & \frac{\partial^5 c_r^n}{\partial y^2 \partial x^3}, \frac{\partial^5 c_r^n}{\partial \theta^2 \partial x^3}, \frac{\partial^5 c_r^n}{\partial x^2 \partial y^3}, \frac{\partial^5 c_r^n}{\partial \theta^2 \partial y^3}, \frac{\partial^5 c_r^n}{\partial x^2 \partial \theta^3}, \frac{\partial^5 c_r^n}{\partial y^2 \partial \theta^3}, \\ & \frac{\partial^2 \mu_{h,r}}{\partial x \partial y}, \frac{\partial^2 \mu_{h,r}}{\partial x \partial \theta}, \frac{\partial^2 \mu_{h,r}}{\partial y \partial x}, \frac{\partial^2 \mu_{h,r}}{\partial \theta \partial x}, \frac{\partial^2 \mu_{v,r}}{\partial y \partial \theta}, \frac{\partial^2 v^n}{\partial x \partial y}, \frac{\partial^2 v^n}{\partial \theta \partial y}, \frac{\partial^2 v^n}{\partial y \partial x}, \frac{\partial^2 v^n}{\partial y \partial \theta}, \frac{\partial^2 w_r''}{\partial x \partial \theta}, \frac{\partial^2 w_r''}{\partial y \partial \theta}, \frac{\partial^2 w_r''}{\partial \theta \partial x}, \frac{\partial^2 w_r''}{\partial \theta \partial y}. \end{aligned}$$

Будем считать, что выполнены условия:

$$k_{11} \leq \frac{h_x}{h_y} \leq k_{12}, k_{21} \leq \frac{h_0}{h_x} \leq k_{22}, k_{31} \leq \frac{h_0}{h_y} \leq k_{32}, \quad (39)$$

$k_{11}, k_{12}, k_{21}, k_{22}, k_{31}, k_{32}$ — некоторые положительные константы.

Для аппроксимации граничных условий введём расширенную сетку:

$$\bar{\omega}^+ = \{(x_i, y_j, \theta_k), i = -1, 0, \dots, N_x + 1, j = -1, 0, \dots, N_y + 1, k = -1, 0, \dots, N_\theta + 1,$$

$$x_i = ih_x; y_j = jh_y; \theta_k = kh_\theta; N_x h_x = L_x; N_y h_y = L_y; N_\theta h_\theta = 1\}.$$

Для узлов сетки $\bar{\omega}^+ \setminus \bar{\omega}$ значения компонент вектора скорости предполагается равным нулю:

$$\bar{c}_r^n(x_i, y_j, \theta_k) = 0, \text{ если } (x_i, y_j, \theta_k) \in \bar{\omega}^+ \setminus \bar{\omega}. \quad (40)$$

Кроме того, будем считать известными значения компонента вектора скоростей водной среды и гидравлической крупности частиц взвеси в узлах сетки $\bar{\omega}^+ \setminus \bar{\omega}$ с дробными значениями индексов: $u^n(-0,5h_x, y_j, \theta_k)$, $u^n(L_x + 0,5h_x, y_j, \theta_k)$, $v^n(x_i, -0,5h_y, \theta_k)$, $v^n(x_i, L_y + 0,5h_y, \theta_k)$ и $w_r''(x_i, y_j, -0,5h_\theta)$, $w_r''(x_i, y_j, 1 + 0,5h_\theta)$.

Граничные условия (10) аппроксимируются следующим образом:

$$\begin{cases} \bar{c}_r^n(0, y_j, \theta_k) = c_r', \text{ если } u^n(0,5h_x, y_j, \theta_k) + u^n(-0,5h_x, y_j, \theta_k) > 0, \\ \bar{c}_r^n(L_x, y_j, \theta_k) = c_r', \text{ если } u^n(L_x - 0,5h_x, y_j, \theta_k) + u^n(L_x + 0,5h_x, y_j, \theta_k) < 0, (x_i, y_j, \theta_k) \in \bar{\omega}^+; \end{cases} \quad (41)$$

$$\begin{cases} \bar{c}_r^n(x_i, 0, \theta_k) = c'_r, & \text{если } v^n(x_i, 0, 5h_y, \theta_k) + v^n(x_i, -0, 5h_y, \theta_k) > 0, \\ \bar{c}_r^n(x_i, L_y, \theta_k) = c'_r, & \text{если } v^n(x_i, L_y, -0, 5h_y, \theta_k) + v^n(x_i, L_y, 0, 5h_y, \theta_k) < 0, (x_i, y_j, \theta_k) \in \bar{\omega}^+. \end{cases}$$

В случае потоков на боковых гранях области G , совпадающих по направлению с внешними нормальными к границам, т. е. при выполнении условий

$$\begin{aligned} u^n(0, 5h_x, y_j, \theta_k) + u^n(-0, 5h_x, y_j, \theta_k) < 0, \\ u^n(L_x - 0, 5h_x, y_j, \theta_k) + u^n(L_x + 0, 5h_x, y_j, \theta_k) > 0, (x_i, y_j, \theta_k) \in \bar{\omega}^+; \\ v^n(x_i, 0, 5h_y, \theta_k) + v^n(x_i, -0, 5h_y, \theta_k) < 0, \\ v^n(x_i, L_y - 0, 5h_y, \theta_k) + v^n(x_i, L_y + 0, 5h_y, \theta_k) > 0, (x_i, y_j, \theta_k) \in \bar{\omega}^+ \end{aligned} \quad (42)$$

имеют место граничные условия Неймана.

Перейдём к построению разностной схемы для случая, когда выполнено условие (11).

При $x_i = 0$ условие (11) равносильно следующему:

$$\frac{\partial \bar{c}_r^n(0, y_j, \theta_k)}{\partial x} = 0. \quad (43)$$

На сетке $\bar{\omega}^+$ узел является внутренним (рис. 1).

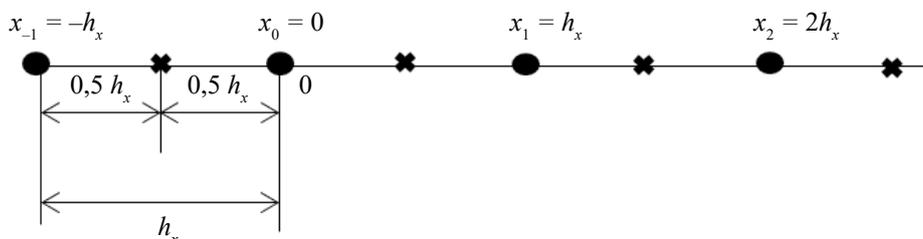


Рис. 1. Построение расширенной сетки на левом конце отрезка $0 \leq x_i \leq L_x$

Разностная схема в узлах $(0, y_j, \theta_k)$ запишется в виде:

$$\begin{aligned} & \frac{\bar{c}_r^n(0, y_j, \theta_k) - \bar{c}_r^{n-1}(0, y_j, \theta_k)}{\tau} + \frac{1}{2h_x} (u^n(0, 5h_x, y_j, \theta_k) \bar{c}_r^n(h_x, y_j, \theta_k) - u^n(-0, 5h_x, y_j, \theta_k) \bar{c}_r^n(-h_x, y_j, \theta_k)) + \\ & + \frac{1}{2h_y} (v^n(0, y_j + 0, 5h_y, \theta_k) \bar{c}_r^n(0, y_j + h_y, \theta_k) - v^n(0, y_j - 0, 5h_y, \theta_k) (\bar{c}_r^n(0, y_j - h_y, \theta_k))) + \frac{1}{2H(0, y_j)h_0} \cdot \\ & \cdot (w_r^n(0, y_j, \theta_k + 0, 5h_0) \bar{c}_r^n(0, y_j, \theta_k + h_0) - w_r^n(0, y_j, \theta_k - 0, 5h_0) \bar{c}_r^n(0, y_j, \theta_k - h_0)) = \frac{1}{h_x^2} (\mu_{h,r}(0, 5h_x, y_j, \theta_k) \cdot \\ & \cdot (\bar{c}_r^n(h_x, y_j, \theta_k) - \bar{c}_r^n(0, y_j, \theta_k)) - \mu_{h,r}(-0, 5h_x, y_j, \theta_k) (\bar{c}_r^n(0, y_j, \theta_k) - \bar{c}_r^n(-h_x, y_j, \theta_k))) + \frac{1}{h_y^2} \cdot \\ & \cdot (\mu_{h,r}(0, y_j + 0, 5h_y, \theta_k) (\bar{c}_r^n(0, y_j + h_y, \theta_k) - \bar{c}_r^n(0, y_j, \theta_k)) - \mu_{h,r}(0, y_j - 0, 5h_y, \theta_k) (\bar{c}_r^n(0, y_j, \theta_k) - \\ & - \bar{c}_r^n(0, y_j - h_y, \theta_k))) + \frac{1}{H^2(0, y_j)h_0^2} (\mu_{v,r}(0, y_j, \theta_k + 0, 5h_0) (\bar{c}_r^n(0, y_j, \theta_k + h_0) - \bar{c}_r^n(0, y_j, \theta_k)) - \\ & - \mu_{v,r}(0, y_j, \theta_k - 0, 5h_0) (\bar{c}_r^n(0, y_j, \theta_k) - \bar{c}_r^n(0, y_j, \theta_k - h_0))) + \bar{F}_r^n, \\ & (0, y_j, \theta_k) \in \bar{\omega}^+, r=1, 2, 3, n=1, \dots, N_t. \end{aligned} \quad (44)$$

В своих рассуждениях ориентируемся на аппроксимацию рассматриваемого граничного условия по формуле центральных разностей и исключение из полученного выражения и уравнения (44) значений в фиктивном узле $(-h_x, y_j, \theta_k)$. Функции $\bar{c}_r^n(-h_x, y_j, \theta_k)$ будут входить в выражения:

$$\frac{1}{2h_x} (u^n(0, 5h_x, y_j, \theta_k) \bar{c}_r^n(h_x, y_j, \theta_k) - u^n(-0, 5h_x, y_j, \theta_k) \bar{c}_r^n(-h_x, y_j, \theta_k))$$

$$\frac{1}{h_x^2}(\mu_{h,r}(0,5h_x,y_j,\theta_k)(\bar{c}_r^n(h_x,y_j,\theta_k)-\bar{c}_r^n(0,y_j,\theta_k))-\mu_{h,r}(-0,5h_x,y_j,\theta_k)(\bar{c}_r^n(0,y_j,\theta_k)-\bar{c}_r^n(-h_x,y_j,\theta_k))),$$

которые мы соответственно обозначим как $C_0\bar{c}_r^n|_{x_i=0}$ и $D\bar{c}_r^n|_{x_i=0}$.

Условие (43) запишем в виде:

$$\frac{\bar{c}_r^n(h_x,y_j,\theta_k)-\bar{c}_r^n(-h_x,y_j,\theta_k)}{2h_x}=0 \quad (45)$$

и из него получим:

$$\bar{c}_r^n(-h_x,y_j,\theta_k)=\bar{c}_r^n(h_x,y_j,\theta_k). \quad (46)$$

Подставляя полученное по формуле (46) значение $\bar{c}_r^n(-h_x,y_j,\theta_k)$ в выражение для $C_0\bar{c}_r^n|_{x_i=0}$, находим:

$$C_0\bar{c}_r^n|_{x_i=0} \cong \frac{1}{2h_x}(u^n(0,5h_x,y_j,\theta_k)-u^n(-0,5h_x,y_j,\theta_k))\bar{c}_r^n(h_x,y_j,\theta_k). \quad (47)$$

Предварительные выкладки показали, что при использовании равенства (45) погрешность аппроксимация выражения для $C_0\bar{c}_r^n|_{x_i=0}$ будет $O(h^2)$, а выражения для $D\bar{c}_r^n|_{x_i=0}$ — $O(h_x)$. Чтобы получить общий порядок погрешности аппроксимации $O(h^2)$ разностной схемы, для оператора $D\bar{c}_r^n|_{x_i=0}$ будет предложен иной подход.

При разложении функций $c_r^n(\pm h_x,y_j,\theta_k)$ в ряд Тейлора в окрестности точки $(0,y_j,\theta_k)$ получаем:

$$c_r^n(\pm h_x,y_j,\theta_k)=c_r^n(0,y_j,\theta_k) \pm \frac{\partial c_r^n(0,y_j,\theta_k)}{\partial x}h_x + \frac{\partial^2 c_r^n(0,y_j,\theta_k)h_x^2}{2} \pm \frac{\partial^3 c_r^n(0,y_j,\theta_k)h_x^3}{6} + \frac{\partial^4 c_r^n(0,y_j,\theta_k)h_x^4}{24} + O(h_x^5). \quad (48)$$

При использовании соотношения (48) выпишем в явном виде главный член невязки:

$$\frac{\bar{c}_r^n(h_x,y_j,\theta_k)-\bar{c}_r^n(-h_x,y_j,\theta_k)}{2h_x} = \frac{\partial c_r^n(0,y_j,\theta_k)}{\partial x} + \frac{\partial^3 c_r^n(0,y_j,\theta_k)h_x^2}{6} + O(h_x^4).$$

Последнее выражение с учётом условия $\frac{\partial c_r^n(0,y_j,\theta_k)}{\partial x}=0$ может быть записано в виде:

$$\frac{\bar{c}_r^n(h_x,y_j,\theta_k)-\bar{c}_r^n(-h_x,y_j,\theta_k)}{2h_x} = \frac{h_x^2}{6} \frac{\partial^3 c_r^n(0,y_j,\theta_k)}{\partial x^3} + O(h_x^4). \quad (49)$$

С помощью равенства (49) найдем значение функции c_r^{n-1} в фиктивном узле $(-h_x,y,\theta)$ из выражения:

$$\bar{c}_r^n(-h_x,y_j,\theta_k)=\bar{c}_r^n(h_x,y_j,\theta_k) - \frac{h_x^3}{3} \frac{\partial^3 c_r^n(0,y_j,\theta_k)}{\partial x^3} + O(h_x^5). \quad (50)$$

Дальнейшие рассуждения будут направлены на аппроксимацию производной $\frac{\partial^3 c_r^n(0,y_j,\theta_k)}{\partial x^3}$.

Обе части уравнения (8) продифференцируем по переменной x и из полученного равенства выразим производную $\frac{\partial^3 \bar{c}_r^n}{\partial x^3}$. Далее здесь перейдем к пределу при $x \rightarrow 0$ и учитывая, что $\frac{\partial c_r^n(0,y_j,\theta_k)}{\partial x}=0$, находим:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^3 c_r^n(0,y_j,\theta_k)}{\partial x^3} &= \frac{1}{\mu_{h,r}(0,y_j,\theta_k)} \left[\frac{\partial^2 c_r^n(0,y_j,\theta_k)}{\partial x \partial t} + u^n(0,y_j,\theta_k) \frac{\partial^2 c_r^n(0,y_j,\theta_k)}{\partial x^2} + \frac{\partial v^n(0,y_j,\theta_k)}{\partial x} \frac{\partial c_r^n(0,y_j,\theta_k)}{\partial y} + \right. \\ &+ v^n(0,y_j,\theta_k) \frac{\partial^2 c_r^n(0,y_j,\theta_k)}{\partial x \partial y} + \frac{1}{H(0,y_j)} \frac{\partial w_r^n(0,y_j,\theta_k)}{\partial x} \frac{\partial c_r^n(0,y_j,\theta_k)}{\partial \theta} + \frac{1}{H(0,y_j)} w_r^n(0,y_j,\theta_k) \frac{\partial^2 c_r^n(0,y_j,\theta_k)}{\partial x \partial \theta} + \\ &+ \frac{1}{2} \frac{\partial^2 u^n(0,y_j,\theta_k)}{\partial x^2} c_r^n(0,y_j,\theta_k) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 v^n(0,y_j,\theta_k)}{\partial x \partial y} c_r^n(0,y_j,\theta_k) + \frac{1}{2H(0,y_j)} \frac{\partial^2 w_r^n(0,y_j,\theta_k)}{\partial x \partial \theta} c_r^n(0,y_j,\theta_k) - \\ &\left. \frac{\partial \mu_{h,r}(0,y_j,\theta_k)}{\partial x} \frac{\partial^2 c_r^n(0,y_j,\theta_k)}{\partial x^2} - \frac{\partial \mu_{h,r}(0,y_j,\theta_k)}{\partial x} \frac{\partial^2 \bar{c}_r^n(0,y_j,\theta_k)}{\partial y^2} - \mu_{h,r}(0,y_j,\theta_k) \frac{\partial^3 \bar{c}_r^n}{\partial x \partial y^2} - \frac{1}{H^2(0,y_j)} \right]. \end{aligned} \quad (51)$$

$$\left(\frac{\partial^2 \mu_{v,r}(0, y_j, \theta_k) \partial c_r^n(0, y_j, \theta_k)}{\partial x \partial \theta} + \frac{\partial \mu_{v,r}(0, y_j, \theta_k) \partial^2 c_r^n(0, y_j, \theta_k)}{\partial \theta} + \frac{\partial \mu_{v,r}(0, y_j, \theta_k) \partial^2 c_r^n(0, y_j, \theta_k)}{\partial x \partial \theta} + \frac{\partial \mu_{v,r}(0, y_j, \theta_k) \partial^2 c_r^n(0, y_j, \theta_k)}{\partial x \partial \theta^2} + \mu_{v,r}(0, y_j, \theta_k) \frac{\partial^3 c_r^n(0, y_j, \theta_k)}{\partial x \partial \theta^2} \right), r=1,2,3, (0, y_j, \theta_k) \in \bar{G}.$$

Очевидным образом, здесь выполнено равенство:

$$\frac{\partial F_1^n(0, y_j, \theta_k)}{\partial x} = \frac{\partial F_2^n(0, y_j, \theta_k)}{\partial x} = \frac{\partial F_3^n(0, y_j, \theta_k)}{\partial x} = 0.$$

Для удобства восприятия текста читателем, аппроксимацию выражения в прямых скобках из правой части выражения (51) проведем для каждого слагаемого отдельно. Изначально отметим, что для коэффициента $\frac{1}{\mu_{h,r}(0, y_j, \theta_k)}$, стоящего перед данной скобкой, используем выражение:

$$\frac{1}{\mu_{h,r}(0, y_j, \theta_k)} = \frac{2}{\mu_{h,r}(0, 5h_x, y_j, \theta_k) + \mu_{h,r}(-0, 5h_x, y_j, \theta_k)}. \quad (52)$$

Рассмотрим производную $\frac{\partial^2 c_r^n(0, y_j, \theta_k)}{\partial x \partial t}$. Для неё имеем:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 c_r^n(0, y_j, \theta_k)}{\partial x \partial t} &= \frac{1}{2h_x} \left(\frac{\partial \bar{c}_r^n(h_x, y_j, \theta_k, t_n)}{\partial t} - \frac{\partial \bar{c}_r^n(-h_x, y_j, \theta_k, t_n)}{\partial t} \right) + O(h_x^2) = \frac{1}{2h_x} \\ &\cdot \left(\frac{\bar{c}_r^n(h_x, y_j, \theta_k, t_n + \tau) - \bar{c}_r^n(h_x, y_j, \theta_k, t_n - \tau)}{2\tau} - \frac{\bar{c}_r^n(-h_x, y_j, \theta_k, t_n + \tau) - \bar{c}_r^n(-h_x, y_j, \theta_k, t_n - \tau)}{2\tau} \right) + O(\tau^2) + \\ &+ O(h_x^2) = \frac{1}{2h_x} \left(\frac{\bar{c}_r^n(h_x, y_j, \theta_k, t_n + \tau) - \bar{c}_r^n(-h_x, y_j, \theta_k, t_n + \tau)}{2h_x} - \frac{\bar{c}_r^n(h_x, y_j, \theta_k, t_n - \tau) - \bar{c}_r^n(-h_x, y_j, \theta_k, t_n - \tau)}{2h_x} \right) + \\ &+ \frac{1}{2h_x} O(\tau^2) + O(h_x^2). \end{aligned} \quad (53)$$

Используя равенство (50), могут быть записаны соотношения:

$$\frac{\bar{c}_r^n(h_x, y_j, \theta_k, t_n \pm \tau) - \bar{c}_r^n(-h_x, y_j, \theta_k, t_n \pm \tau)}{2h_x} = \frac{h_x^2}{6} \frac{\partial^3 c_r^n(0, y_j, \theta_k, t_n \pm \tau)}{\partial x^3} + O(h_x^4). \quad (54)$$

С помощью равенства (54) преобразуем равенство (53):

$$\frac{\partial^2 c_r^n}{\partial x \partial t} = \frac{1}{2\tau} \frac{h_x^2}{6} \left(\frac{\partial^3 c_r^n(0, y_j, \theta_k, t_n + \tau)}{\partial x^3} - \frac{\partial^3 c_r^n(0, y_j, \theta_k, t_n - \tau)}{\partial x^3} \right) + \frac{1}{2h_x} O(\tau^2) + O(h_x^2).$$

Введя обозначение $\varphi(0, y_j, \theta_k, t_n \pm \tau) = \frac{\partial^3 c_r^n(0, y_j, \theta_k, t_n \pm \tau)}{\partial x^3}$, последнее равенство запишем в виде:

$$\frac{\partial^2 c_r^n}{\partial x \partial t} = \frac{h_x^2}{6} \left(\frac{\varphi(0, y_j, \theta_k, t_n + \tau) - \varphi(0, y_j, \theta_k, t_n - \tau)}{2\tau} \right) + \frac{1}{2h_x} O(\tau^2) + O(h_x^2). \quad (55)$$

Откуда следует:

$$\frac{\partial^2 c_r^n}{\partial x \partial t} = \frac{h_x^2}{6} \left(\frac{\partial \varphi(0, y_j, \theta_k, t_n)}{\partial t} + O(\tau^2) \right) + \frac{1}{2h_x} O(\tau^2) + O(h_x^2).$$

В соответствии с условием Куранта [11] величина τ ограничена и можем считать выполнимым равенство: $\frac{1}{2h_x} O(\tau^2) = O(h_x)$. С учётом сказанного, имеем:

$$\frac{\partial^2 c_r^n}{\partial x \partial t} = \frac{h_x^2}{6} \frac{\partial \varphi(0, y_j, \theta_k, t_n)}{\partial t} + O(h_x). \quad (56)$$

Учитывая соотношение (56) при ограниченности производной $\frac{\partial \varphi(0, y_j, \theta_k, t_n \pm \tau)}{\partial t} = \frac{\partial^4 c_r^n(0, y_j, \theta_k, t_n \pm \tau)}{\partial t \partial x^3}$ с точностью до $O(h_x)$ выражение $\frac{\partial^2 c_r^n(0, y_j, \theta_k)}{\partial x \partial t}$ равно нулю.

Далее покажем, что производная $\frac{\partial^3 c_r^n(0, y_j, \theta_k)}{\partial x \partial y^2}$ при аппроксимации с погрешностью $O(h_x)$ также обращается в ноль.

С учетом неравенства $k_{11} \leq \frac{h_x}{h_y} \leq k_{12}$ из (39), имеем:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^3 c_r^n(0, y_j, \theta_k)}{\partial x \partial y^2} &= \frac{1}{2h_x} \left(\frac{\partial^2 \bar{c}_r^n(h_x, y_j, \theta_k)}{\partial y^2} - \frac{\partial^2 \bar{c}_r^n(-h_x, y_j, \theta_k)}{\partial y^2} \right) + O(h_x^2) = \\ &= \frac{1}{2h_x} \left(\frac{\bar{c}_r^n(h_x, y_j + h_y, \theta_k) - 2\bar{c}_r^n(h_x, y_j, \theta_k) + \bar{c}_r^n(h_x, y_j - h_y, \theta_k)}{h_y^2} - \right. \\ &\quad \left. \frac{\bar{c}_r^n(-h_x, y_j + h_y, \theta_k) - 2\bar{c}_r^n(-h_x, y_j, \theta_k) + \bar{c}_r^n(-h_x, y_j - h_y, \theta_k)}{h_y^2} + O(h_y^2) \right) + O(h_x^2) = \\ &= \frac{1}{h_y^2} \left(\frac{\bar{c}_r^n(h_x, y_j + h_y, \theta_k) - \bar{c}_r^n(-h_x, y_j + h_y, \theta_k)}{2h_x} - 2 \frac{\bar{c}_r^n(h_x, y_j, \theta_k) - \bar{c}_r^n(-h_x, y_j, \theta_k)}{2h_x} + \right. \\ &\quad \left. + \frac{\bar{c}_r^n(h_x, y_j - h_y, \theta_k) - \bar{c}_r^n(-h_x, y_j - h_y, \theta_k)}{2h_x} \right) + \frac{1}{2h_x} O(h_y^2) + O(h_x^2) = \\ &= \frac{1}{h_y^2} \left(\frac{\bar{c}_r^n(h_x, y_j + h_y, \theta_k) - \bar{c}_r^n(-h_x, y_j + h_y, \theta_k)}{2h_x} - 2 \frac{\bar{c}_r^n(h_x, y_j, \theta_k) - \bar{c}_r^n(-h_x, y_j, \theta_k)}{2h_x} + \right. \\ &\quad \left. + \frac{\bar{c}_r^n(h_x, y_j - h_y, \theta_k) - \bar{c}_r^n(-h_x, y_j - h_y, \theta_k)}{2h_x} \right) + O(h_x^2 + h_y). \end{aligned} \quad (57)$$

На основе равенства (57), может быть записано соотношение:

$$\frac{\bar{c}_r^n(h_x, y_j \pm h_y, \theta_k) - \bar{c}_r^n(-h_x, y_j \pm h_y, \theta_k)}{2h_x} = \frac{h_x^2}{6} \frac{\partial^3 c_r^n(0, y_j \pm h_y, \theta_k)}{\partial x^3} + O(h_x^4). \quad (58)$$

Используя равенства (58), преобразуем соотношение (57):

$$\frac{\partial^3 c_r^n(0, y_j, \theta_k)}{\partial x \partial y^2} = \frac{1}{h_y^2} \frac{h_x^2}{6} \left(\frac{\partial^3 c_r^n(0, y_j + h_y, \theta_k)}{\partial x^3} - 2 \frac{\partial^3 c_r^n(0, y_j, \theta_k)}{\partial x^3} + \frac{\partial^3 c_r^n(0, y_j - h_y, \theta_k)}{\partial x^3} \right) + O(h_x^2 + h_y).$$

Пусть $\varphi(0, y_j \pm h_y, \theta_k) = \frac{\partial^3 c_r^n(0, y_j \pm h_y, \theta_k)}{\partial x^3}$, $\varphi(0, y_j, \theta_k) = \frac{\partial^3 c_r^n(0, y_j, \theta_k)}{\partial x^3}$. Тогда последнее равенство может быть записано в виде:

$$\frac{\partial^3 c_r^n(0, y_j, \theta_k)}{\partial x \partial y^2} = \frac{h_x^2}{6} \left(\frac{\varphi(0, y_j + h_y, \theta_k) - 2\varphi(0, y_j, \theta_k) + \varphi(0, y_j - h_y, \theta_k)}{h_y^2} \right) + O(h_x^2 + h_y). \quad (59)$$

Из равенства (59) следует:

$$\frac{\partial^3 c_r^n(0, y_j, \theta_k)}{\partial x \partial y^2} = \frac{h_x^2}{6} \left(\frac{\partial^2 \varphi(0, y_j, \theta_k)}{\partial y^2} + O(h_y^2) \right) + O(h_x^2 + h_y).$$

Последнее равенство можно преобразовать к виду:

$$\frac{\partial^3 c_r^n(0, y_j, \theta_k)}{\partial x \partial y^2} = \frac{h_x^2}{6} \frac{\partial^2 \varphi(0, y_j, \theta_k)}{\partial y^2} + O(h_x). \quad (60)$$

Учитывая соотношение (60) при ограниченности производной $\frac{\partial^2 \varphi(0, y_j, \theta_k)}{\partial y^2} = \frac{\partial^5 c_r^n(0, y_j, \theta_k)}{\partial y^2 \partial x^3}$ с точностью до $O(h_x)$ выражение $\frac{\partial^3 c_r^n(0, y_j, \theta_k)}{\partial x \partial y^2}$ равно нулю.

Проводя аналогичные рассуждения для производных $\frac{\partial^3 c_r^n(0, y_j, \theta_k)}{\partial x \partial \theta^2}$, $\frac{\partial^2 c_r^n(0, y_j, \theta_k)}{\partial x \partial y}$, $\frac{\partial^2 c_r^n(0, y_j, \theta_k)}{\partial x \partial \theta}$ можно легко убедиться, что при выполнении неравенств из (40), с точностью до $O(h_x)$ эти производные равны нулю.

Обратимся к производной $\frac{\partial^2 c_r^n(0, y_j, \theta_k)}{\partial x^2}$. Имеем:

$$\frac{\partial^2 c_r^n(0, y_j, \theta_k)}{\partial x^2} = \frac{\bar{c}_r^n(h_x, y_j, \theta_k) - 2\bar{c}_r^n(0, y_j, \theta_k) + \bar{c}_r^n(-h_x, y_j, \theta_k)}{h_x^2} + O(h_x^2). \quad (61)$$

В последнем равенстве значение функции \bar{c}_r^n в фиктивном узле $(-h_x, y_j, \theta_k)$ будет заменено с помощью выражения (50). Получаем

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 c_r^n(0, y_j, \theta_k)}{\partial x^2} &= \frac{1}{h_x^2} \left(\bar{c}_r^n(h_x, y_j, \theta_k) - 2\bar{c}_r^n(0, y_j, \theta_k) + \left(\bar{c}_r^n(h_x, y_j, \theta_k) - \frac{h_x^3}{3} \frac{\partial^3 c_r^n(0, y_j, \theta_k)}{\partial x^3} + O(h_x^5) \right) \right) + \\ &+ O(h_x^2) = \frac{1}{h_x^2} \left(2(\bar{c}_r^n(h_x, y_j, \theta_k) - \bar{c}_r^n(0, y_j, \theta_k)) - \frac{h_x^3}{3} \frac{\partial^3 c_r^n(0, y_j, \theta_k)}{\partial x^3} \right) + O(h_x^2) \end{aligned}$$

или

$$\frac{\partial^2 c_r^n(0, y_j, \theta_k)}{\partial x^2} \cong \frac{2}{h_x^2} (\bar{c}_r^n(h_x, y_j, \theta_k) - \bar{c}_r^n(0, y_j, \theta_k)) - \frac{h_x}{3} \frac{\partial^3 c_r^n(0, y_j, \theta_k)}{\partial x^3}. \quad (62)$$

Слагаемые $u^n(0, y_j, \theta_k) \frac{\partial^2 c_r^n(0, y_j, \theta_k)}{\partial x^2}$ и $\frac{\partial \mu_{h,r}(0, y_j, \theta_k)}{\partial x} \frac{\partial^2 c_r^n(0, y_j, \theta_k)}{\partial x^2}$ из равенства (51), включающие множителем $\frac{\partial^2 c_r^n(0, y_j, \theta_k)}{\partial x^2}$, с использованием соотношения (62), аппроксимируются выражениями:

$$\begin{aligned} u^n(0, y_j, \theta_k) \frac{\partial^2 c_r^n(0, y_j, \theta_k)}{\partial x^2} &\cong \frac{1}{2} (u^n(0, 5h_x, y_j, \theta_k) + u^n(-0, 5h_x, y_j, \theta_k)) \left(\frac{2}{h_x^2} (\bar{c}_r^n(h_x, y_j, \theta_k) - \bar{c}_r^n(0, y_j, \theta_k)) - \right. \\ &\left. \frac{h_x}{3} \frac{\partial^3 c_r^n(0, y_j, \theta_k)}{\partial x^3} \right); \end{aligned} \quad (63)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mu_{h,r}(0, y_j, \theta_k)}{\partial x} \frac{\partial^2 c_r^n(0, y_j, \theta_k)}{\partial x^2} &\cong \frac{1}{h_x} (\mu_{h,r}(0, 5h_x, y_j, \theta_k) - \mu_{h,r}(-0, 5h_x, y_j, \theta_k)) \left(\frac{2}{h_x^2} (\bar{c}_r^n(h_x, y_j, \theta_k) - \right. \\ &\left. - \bar{c}_r^n(0, y_j, \theta_k)) - \frac{h_x}{3} \frac{\partial^3 c_r^n(0, y_j, \theta_k)}{\partial x^3} \right). \end{aligned} \quad (64)$$

При аппроксимации производной $\frac{\partial^2 c_r^n(0, y_j, \theta_k)}{\partial y^2}$, получаем:

$$\frac{\partial^2 c_r^n(0, y_j, \theta_k)}{\partial y^2} = \frac{\bar{c}_r^n(0, y_j + h_y, \theta_k) - 2\bar{c}_r^n(0, y_j, \theta_k) + \bar{c}_r^n(0, y_j - h_y, \theta_k)}{h_y^2} + O(h_y^2). \quad (65)$$

Аппроксимируя слагаемое $\frac{\partial \mu_{h,r}(0, y_j, \theta_k)}{\partial x} \frac{\partial^2 c_r^n(0, y_j, \theta_k)}{\partial y^2}$ из равенства (51), включающее множителем $\frac{\partial^2 c_r^n(0, y_j, \theta_k)}{\partial y^2}$,

с использованием соотношения (65), получаем:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mu_{h,r}(0, y_j, \theta_k)}{\partial x} \frac{\partial^2 c_r^n(0, y_j, \theta_k)}{\partial y^2} &\cong \frac{1}{h_x h_y^2} (\mu_{h,r}(0, 5h_x, y_j, \theta_k) - \mu_{h,r}(-0, 5h_x, y_j, \theta_k)) (\bar{c}_r^n(0, y_j + h_y, \theta_k) - \\ &- 2\bar{c}_r^n(0, y_j, \theta_k) + \bar{c}_r^n(0, y_j - h_y, \theta_k)). \end{aligned} \quad (66)$$

Аппроксимация вида (66) выполнена с точностью $O(h_x)$. В самом деле, не сложно убедиться:

$$\bar{c}_r^n(0, y_j + h_y, \theta_k) - 2\bar{c}_r^n(0, y_j, \theta_k) + \bar{c}_r^n(0, y_j - h_y, \theta_k) = \frac{\partial^2 c_r^n(0, y_j, \theta_k)}{\partial y^2} h_y^2 + O(h_y^3), \quad (67)$$

$$\mu_{h,r}(0, 5h_x, y_j, \theta_k) - \mu_{h,r}(-0, 5h_x, y_j, \theta_k) = \frac{\partial \mu_{h,r}(0, y_j, \theta_k)}{\partial x} h_x + O(h_x^3). \quad (68)$$

С учётом равенств (67), (68) для соотношения (66), получаем:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mu_{h,r}(0, y_j, \theta_k) \partial^2 c_r^n(0, y_j, \theta_k)}{\partial x \partial y^2} &= \frac{1}{h_x h_y^2} \left(\frac{\partial \mu_{h,r}(0, y_j, \theta_k)}{\partial x} h_x + O(h_x^3) \right) \left(\frac{\partial^2 \bar{c}_r^n(0, y_j, \theta_k)}{\partial y^2} h_y^2 + O(h_y^3) \right) = \\ &= \frac{\partial \mu_{h,r}(0, y_j, \theta_k) \partial^2 \bar{c}_r^n(0, y_j, \theta_k)}{\partial x \partial y^2} + O(h_x). \end{aligned} \quad (69)$$

При аппроксимации производной $\frac{\partial^2 c_r^n(0, y_j, \theta_k)}{\partial \theta^2}$, получаем:

$$\frac{\partial^2 c_r^n(0, y_j, \theta_k)}{\partial \theta^2} = \frac{\bar{c}_r^n(0, y_j, \theta_k + h_0) - 2\bar{c}_r^n(0, y_j, \theta_k) + \bar{c}_r^n(0, y_j, \theta_k - h_0)}{h_0^2} + O(h_0^2). \quad (70)$$

Тогда для слагаемого $\frac{1}{H^2(0, y_j)} \frac{\partial \mu_{v,r}(0, y_j, \theta_k) \partial^2 c_r^n(0, y_j, \theta_k)}{\partial x \partial \theta^2}$ из равенства (51), включающего множителем $\frac{\partial^2 c_r^n(0, y_j, \theta_k)}{\partial \theta^2}$, находим:

$$\begin{aligned} \frac{1}{H^2(0, y_j)} \frac{\partial \mu_{v,r}(0, y_j, \theta_k) \partial^2 c_r^n(0, y_j, \theta_k)}{\partial x \partial \theta^2} &\cong \frac{1}{h_x h_0^2 H^2(0, y_j)} (\mu_{v,r}(0, 5h_x, y_j, \theta_k) - \mu_{v,r}(-0, 5h_x, y_j, \theta_k)) \cdot \\ &\cdot (\bar{c}_r^n(0, y_j, \theta_k + h_0) - 2\bar{c}_r^n(0, y_j, \theta_k) + \bar{c}_r^n(0, y_j, \theta_k - h_0)). \end{aligned} \quad (71)$$

Погрешность аппроксимации выражения $\frac{1}{H^2(0, y_j)} \frac{\partial \mu_{v,r}(0, y_j, \theta_k) \partial^2 c_r^n(0, y_j, \theta_k)}{\partial x \partial \theta^2}$ соотношением (71), есть $O(h_x)$. В самом деле, с учётом равенства

$$\bar{c}_r^n(0, y_j, \theta_k + h_0) - 2\bar{c}_r^n(0, y_j, \theta_k) + \bar{c}_r^n(0, y_j, \theta_k - h_0) = 2 \frac{\partial^2 c_r^n(0, y_j, \theta_k) h_0^2}{\partial \theta^2} + O(h_0^3), \quad (72)$$

получаем:

$$\begin{aligned} \frac{1}{H^2(0, y_j)} \frac{\partial \mu_{v,r}(0, y_j, \theta_k) \partial^2 c_r^n(0, y_j, \theta_k)}{\partial x \partial \theta^2} &= \frac{1}{h_x h_0^2 H^2(0, y_j)} \left(\frac{\partial \mu_{h,r}(0, y_j, \theta_k)}{\partial x} h_x + O(h_x^3) \right) \left(\frac{\partial^2 \bar{c}_r^n(0, y_j, \theta_k)}{\partial \theta^2} h_0^2 + \right. \\ &\left. + O(h_0^3) \right) = \frac{\partial \mu_{h,r}(0, y_j, \theta_k) \partial^2 \bar{c}_r^n(0, y_j, \theta_k)}{\partial x \partial \theta^2} + O(h_x). \end{aligned} \quad (73)$$

Далее рассмотрим производную $\frac{\partial c_r^n(0, y_j, \theta_k)}{\partial y}$. При её аппроксимации центральными разностями получаем:

$$\frac{\partial c_r^n(0, y_j, \theta_k)}{\partial y} = \frac{\bar{c}_r^n(0, y_j + h_y, \theta_k) - \bar{c}_r^n(0, y_j - h_y, \theta_k)}{2h_y} + O(h_y^2). \quad (74)$$

Тогда для слагаемого $\frac{\partial v^n(0, y_j, \theta_k) \partial c_r^n(0, y_j, \theta_k)}{\partial x \partial y}$ из равенства (51), включающего множителем $\frac{\partial c_r^n(0, y_j, \theta_k)}{\partial y}$, находим:

$$\begin{aligned} \frac{\partial v^n(0, y_j, \theta_k) \partial c_r^n(0, y_j, \theta_k)}{\partial x \partial y} &\cong \frac{1}{2h_x h_y} (v^n(0, 5h_x, y_j, \theta_k) - v^n(-0, 5h_x, y_j, \theta_k)) (\bar{c}_r^n(0, y_j + h_y, \theta_k) - \\ &- \bar{c}_r^n(0, y_j - h_y, \theta_k)). \end{aligned} \quad (75)$$

Здесь

$$\frac{\partial v^n(0, y_j, \theta_k)}{\partial x} = \frac{v^n(0, 5h_x, y_j, \theta_k) - v^n(-0, 5h_x, y_j, \theta_k)}{h_x} + O(h_x^2). \quad (76)$$

Несложно убедиться, что погрешность аппроксимации для выражения $\frac{\partial v^n(0, y_j, \theta_k) \partial c_r^n(0, y_j, \theta_k)}{\partial x \partial y}$, выполненная соотношением (75), есть $O(h_x^2)$ и имеет место равенство:

$$\begin{aligned} \frac{\partial v^n(0, y_j, \theta_k) \partial c_r^n(0, y_j, \theta_k)}{\partial x \partial y} &= \frac{1}{2h_x h_y} \left(\frac{\partial v^n(0, y_j, \theta_k)}{\partial x} h_x + O(h_x^3) \right) \left(2 \frac{\partial \bar{c}_r^n(0, y_j, \theta_k)}{\partial y} h_y + O(h_y^3) \right) = \\ &= 2 \frac{\partial v^n(0, y_j, \theta_k) \partial \bar{c}_r^n(0, y_j, \theta_k)}{\partial x \partial y} + O(h_x^2). \end{aligned} \quad (77)$$

При аппроксимации производной $\frac{\partial c_r^n(0, y_j, \theta_k)}{\partial \theta}$, получаем:

$$\frac{\partial c_r^n(0, y_j, \theta_k)}{\partial \theta} = \frac{\bar{c}_r^n(0, y_j, \theta_k + h_0) - \bar{c}_r^n(0, y_j, \theta_k - h_0)}{2h_0} + O(h_0^2). \quad (78)$$

Тогда для слагаемых $\frac{1}{H(0, y_j)} \frac{\partial w_r^m(0, y_j, \theta_k)}{\partial x} \frac{\partial c_r^n(0, y_j, \theta_k)}{\partial \theta}$ и $\frac{1}{H^2(0, y_j)} \frac{\partial^2 \mu_{v,r}(0, y_j, \theta_k)}{\partial x \partial \theta} \frac{\partial c_r^n(0, y_j, \theta_k)}{\partial \theta}$ из равенства (51)

включающих множителем $\frac{\partial c_r^n(0, y_j, \theta_k)}{\partial \theta}$, находим:

$$\frac{1}{H(0, y_j)} \frac{\partial w_r^m(0, y_j, \theta_k)}{\partial x} \frac{\partial c_r^n(0, y_j, \theta_k)}{\partial \theta} \cong \frac{1}{2h_x h_0 H(0, y_j)} (w_r^m(0, 5h_x, y_j, \theta_k) - w_r^m(-0, 5h_x, y_j, \theta_k)) \cdot (\bar{c}_r^n(0, y_j, \theta_k + h_0) - \bar{c}_r^n(0, y_j, \theta_k - h_0)); \quad (79)$$

$$\frac{1}{H^2(0, y_j)} \frac{\partial^2 \mu_{v,r}(0, y_j, \theta_k)}{\partial x \partial \theta} \frac{\partial c_r^n(0, y_j, \theta_k)}{\partial \theta} \cong \frac{1}{2h_x h_0^2 H^2(0, y_j)} [(\mu_{v,r}(0, 5h_x, y_j, \theta_k + 0, 5h_0) - \mu_{v,r}(-0, 5h_x, y_j, \theta_k + 0, 5h_0)) - (\mu_{v,r}(0, 5h_x, y_j, \theta_k - 0, 5h_0) - \mu_{v,r}(-0, 5h_x, y_j, \theta_k - 0, 5h_0))] \cdot (\bar{c}_r^n(0, y_j, \theta_k + h_0) - \bar{c}_r^n(0, y_j, \theta_k - h_0)). \quad (80)$$

Здесь при записи соотношений (79), (80) использовались равенства:

$$\frac{\partial w_r^m(0, y_j, \theta_k)}{\partial x} = \frac{w_r^m(0, 5h_x, y_j, \theta_k) - w_r^m(-0, 5h_x, y_j, \theta_k)}{h_x} + O(h_x^2), \quad (81)$$

$$\frac{\partial^2 \mu_{v,r}(0, y_j, \theta_k)}{\partial x \partial \theta} = \frac{1}{h_0} \left(\frac{\mu_{v,r}(0, 5h_x, y_j, \theta_k + 0, 5h_0) - \mu_{v,r}(-0, 5h_x, y_j, \theta_k + 0, 5h_0)}{h_x} - \frac{\mu_{v,r}(0, 5h_x, y_j, \theta_k - 0, 5h_0) - \mu_{v,r}(-0, 5h_x, y_j, \theta_k - 0, 5h_0)}{h_x} \right) + \frac{1}{h_x} O(h_0^2) + O(h_x^2). \quad (82)$$

С учётом неравенства $k_{21} \leq \frac{h_0}{h_x} \leq k_{22}$ из (39) можем утверждать, что аппроксимация вида (80) выполнена с погрешностью $O(h_x)$.

При аппроксимации $c_r^n(0, y_j, \theta_k)$, заменяем её на сеточный аналог $\bar{c}_r^n(0, y_j, \theta_k)$.

Тогда для слагаемых $\frac{1}{2} \frac{\partial^2 u^n(0, y_j, \theta_k)}{\partial x^2} c_r^n(0, y_j, \theta_k)$, $\frac{1}{2} \frac{\partial^2 v^n(0, y_j, \theta_k)}{\partial x \partial y} c_r^n(0, y_j, \theta_k)$ и $\frac{1}{2H(0, y_j)} \frac{\partial^2 w_r^m(0, y_j, \theta_k)}{\partial x \partial \theta} c_r^n(0, y_j, \theta_k)$,

включающих множителем $\bar{c}_r^n(0, y_j, \theta_k)$, находим:

$$\frac{1}{2} \frac{\partial^2 u^n(0, y_j, \theta_k)}{\partial x^2} c_r^n(0, y_j, \theta_k) \cong \frac{1}{0, 5h_x^2 H(0, y_j)} (u^n(0, 5h_x, y_j, \theta_k) - 2u^n(0, y_j, \theta_k) + u^n(-0, 5h_x, y_j, \theta_k)) \cdot \bar{c}_r^n(0, y_j, \theta_k); \quad (83)$$

$$\frac{1}{2} \frac{\partial^2 v^n(0, y_j, \theta_k)}{\partial x \partial y} c_r^n(0, y_j, \theta_k) \cong \frac{1}{2h_x h_y} [(v^n(0, 5h_x, y_j + 0, 5h_y, \theta_k) - v^n(-0, 5h_x, y_j + 0, 5h_y, \theta_k)) - (v^n(0, 5h_x, y_j - 0, 5h_y, \theta_k) - v^n(-0, 5h_x, y_j - 0, 5h_y, \theta_k))] \bar{c}_r^n(0, y_j, \theta_k). \quad (84)$$

$$\frac{1}{2H(0, y_j)} \frac{\partial^2 w_r^m(0, y_j, \theta_k)}{\partial x \partial \theta} c_r^n(0, y_j, \theta_k) \cong \frac{1}{2h_x h_0 H(0, y_j)} [(w_r^m(0, 5h_x, y, \theta_k + 0, 5h_0) - w_r^m(-0, 5h_x, y, \theta_k + 0, 5h_0)) (w_r^m(0, 5h_x, y_j, \theta_k - 0, 5h_0) - w_r^m(-0, 5h_x, y_j, \theta_k - 0, 5h_0))] \bar{c}_r^n(0, y_j, \theta_k). \quad (85)$$

Очевидно, что выражение (83) получено с точностью $O(h_x^2)$.

При записи соотношений (84) и (85) использовались равенства:

$$\frac{\partial^2 v^n(0, y_j, \theta_k)}{\partial x \partial y} = \frac{1}{h_y} \left(\frac{v^n(0, 5h_x, y_j + 0, 5h_y, \theta_k) - v^n(-0, 5h_x, y_j + 0, 5h_y, \theta_k)}{h_x} - \frac{v^n(0, 5h_x, y_j - 0, 5h_y, \theta_k) - v^n(-0, 5h_x, y_j - 0, 5h_y, \theta_k)}{h_x} \right) + \frac{1}{h_x} O(h_y^2) + O(h_x^2), \quad (86)$$

$$\frac{\partial^2 w_r^n(0, y_j, \theta_k)}{\partial x \partial \theta} = \frac{1}{h_\theta} \left(\frac{w_r^n(0, 5h_x, y_j, \theta_k + 0, 5h_\theta) - w_r^n(-0, 5h_x, y_j, \theta_k + 0, 5h_\theta)}{h_x} - \frac{w_r^n(0, 5h_x, y_j, \theta_k - 0, 5h_\theta) - w_r^n(-0, 5h_x, y_j, \theta_k - 0, 5h_\theta)}{h_x} \right) + \frac{1}{h_x} O(h_\theta^2) + O(h_x^2). \quad (87)$$

С учётом равенств (86) и (87) получаем, что погрешность аппроксимаций (84) и (85) есть $O(h_x)$.

Таким образом, получены аппроксимации всех слагаемых, находящихся в скобке правой части равенства (51). В результате подстановки в равенство (51) аппроксимаций, выполненных выражениями (63), (64), (66), (71), (75), (79), (80), (83)–(85) с погрешностью $O(h_x)$ (или выше), получаем:

$$\frac{\partial^3 \bar{c}^n(0, y_j, \theta_k)}{\partial x^3} = \mathfrak{G}_1 + O(h_x), \quad (88)$$

где

$$\begin{aligned} \mathfrak{G}_1 = & \mathfrak{G}_{10}(\mathfrak{G}_{11} \bar{c}(h_x, y_j, \theta_k) + \mathfrak{G}_{12} \bar{c}(0, y_j + h_y, \theta_k) + \mathfrak{G}_{13} \bar{c}(0, y_j - h_y, \theta_k) + \mathfrak{G}_{14} \bar{c}(0, y_j, \theta_k + h_\theta) + \mathfrak{G}_{15} \bar{c}(0, y_j, \theta_k - h_\theta) + \\ & + \mathfrak{G}_{16} \bar{c}(0, y_j, \theta_k)), \\ \mathfrak{G}_{10} = & \frac{3(\mu_{h,r}(0, 5h_x, y_j, \theta_k) + \mu_{h,r}(-0, 5h_x, y_j, \theta_k))}{4\mu_{h,r}(0, 5h_x, y_j, \theta_k) + 2\mu_{h,r}(-0, 5h_x, y_j, \theta_k) - (u^n(0, 5h_x, y_j, \theta_k) + u^n(-0, 5h_x, y_j, \theta_k))h_x}; \\ \mathfrak{G}_{11} = & \frac{1}{h_x^2}(u^n(0, 5h_x, y_j, \theta_k) + u^n(-0, 5h_x, y_j, \theta_k)) - \frac{2}{h_x^3}(\mu_{h,r}(0, 5h_x, y_j, \theta_k) - \mu_{h,r}(-0, 5h_x, y_j, \theta_k)); \\ \mathfrak{G}_{12} = & \frac{1}{h_x^2}(u^n(0, 5h_x, y_j, \theta_k) + u^n(-0, 5h_x, y_j, \theta_k)) - \frac{2}{h_x^3}(\mu_{h,r}(0, 5h_x, y_j, \theta_k) - \mu_{h,r}(-0, 5h_x, y_j, \theta_k)); \\ \mathfrak{G}_{13} = & \frac{1}{2h_x h_y}(v^n(0, 5h_x, y_j, \theta_k) - v^n(-0, 5h_x, y_j, \theta_k)) - \frac{1}{h_x h_y^2}(\mu_{h,r}(0, 5h_x, y_j, \theta_k) - \mu_{v,r}(-0, 5h_x, y_j, \theta_k)); \\ \mathfrak{G}_{14} = & -\frac{1}{2h_x h_y}(v^n(0, 5h_x, y_j, \theta_k) - v^n(-0, 5h_x, y_j, \theta_k)) - \frac{1}{h_x h_y^2}(\mu_{h,r}(0, 5h_x, y_j, \theta_k) - \mu_{v,r}(-0, 5h_x, y_j, \theta_k)); \\ \mathfrak{G}_{15} = & \frac{1}{2h_x h_\theta H(0, y_j)}(w_r^n(0, 5h_x, y_j, \theta_k) - w_r^n(-0, 5h_x, y_j, \theta_k)) - \frac{1}{h_x h_\theta^2 H^2(0, y_j)}(\mu_{v,r}(0, 5h_x, y_j, \theta_k) - \\ & - \mu_{v,r}(-0, 5h_x, y_j, \theta_k)) - \frac{1}{2h_x h_\theta^2 H^2(0, y_j)}(\mu_{v,r}(0, 5h_x, y_j, \theta_k + 0, 5h_\theta) - \mu_{v,r}(-0, 5h_x, y_j, \theta_k + 0, 5h_\theta) - \\ & - \mu_{v,r}(0, 5h_x, y_j, \theta_k - 0, 5h_\theta) + \mu_{v,r}(-0, 5h_x, y_j, \theta_k - 0, 5h_\theta)); \\ \mathfrak{G}_{16} = & \frac{1}{2h_x h_\theta H(0, y_j)}(w_r^n(0, 5h_x, y_j, \theta_k) - w_r^n(-0, 5h_x, y_j, \theta_k)) - \frac{1}{h_x h_\theta^2 H^2(0, y_j)}(\mu_{v,r}(0, 5h_x, y_j, \theta_k) - \\ & - \mu_{v,r}(-0, 5h_x, y_j, \theta_k)) + \frac{1}{2h_x h_\theta^2 H^2(0, y_j)}(\mu_{v,r}(0, 5h_x, y_j, \theta_k + 0, 5h_\theta) - \mu_{v,r}(-0, 5h_x, y_j, \theta_k + 0, 5h_\theta) - \\ & - \mu_{v,r}(0, 5h_x, y_j, \theta_k - 0, 5h_\theta) + \mu_{v,r}(-0, 5h_x, y_j, \theta_k - 0, 5h_\theta)); \\ \mathfrak{G}_{17} = & \frac{1}{h_x^2}(u^n(0, 5h_x, y_j, \theta_k) + u^n(-0, 5h_x, y_j, \theta_k)) + \frac{2}{h_x^3 H(0, y_j)}(u^n(0, 5h_x, y_j, \theta_k) - \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & -2u^n(0, y_j, \theta_k) + u^n(-0.5h_x, y_j, \theta_k) + \frac{1}{2h_x h_y} (v^n(0.5h_x, y_j + 0.5h_y, \theta_k) - v^n(-0.5h_x, y_j + 0.5h_y, \theta_k)) - \\
 & -v^n(0.5h_x, y_j - 0.5h_y, \theta_k) + v^n(-0.5h_x, y_j - 0.5h_y, \theta_k) + \frac{1}{2h_x h_0 H(0, y_j)} (w_r^n(0.5h_x, y_j, \theta_k + 0.5h_0) - \\
 & -w_r^n(-0.5h_x, y_j, \theta_k + 0.5h_0) - w_r^n(0.5h_x, y_j, \theta_k - 0.5h_0) + w_r^n(-0.5h_x, y_j, \theta_k - 0.5h_0)) + \\
 & + 2 \left(\frac{1}{h_x^3} + \frac{1}{h_x h_y^2} + \frac{1}{h_x h_0^2 H^2(0, y_j)} \right) (\mu_{h,r}(0.5h_x, y_j, \theta) - \mu_{h,r}(-0.5h_x, y_j, \theta_k)).
 \end{aligned}$$

Используя равенство (88) для $D\bar{c}_r^n|_{x_i=0}$ можем составить выражение:

$$\begin{aligned}
 D\bar{c}_r^n|_{x_i=0} \cong \frac{1}{h_x^2} (\mu_{h,r}(0.5h_x, y_j, \theta_k) + \mu_{h,r}(-0.5h_x, y_j, \theta_k)) (\bar{c}_r^n(h_x, y_j, \theta_k) - \bar{c}_r^n(0, y_j, \theta_k)) - \\
 - \mu_{h,r}(-0.5h_x, y_j, \theta_k) \frac{h_x}{3} \vartheta_1.
 \end{aligned} \tag{89}$$

Окончательно, разностная схема (44) с учётом соотношений (47) и (89) примет вид:

$$\begin{aligned}
 & \frac{\bar{c}_r^n - \bar{c}_r^{n-1}}{\tau} + \frac{1}{2h_x} (u^n(0.5h_x, y_j, \theta_k) - u^n(-0.5h_x, y_j, \theta_k)) \bar{c}_r^n(h_x, y_j, \theta_k) + \\
 & + \frac{1}{2h_y} (v^n(0, y_j + 0.5h_y, \theta_k) \bar{c}_r^n(0, y_j + h_y, \theta_k) - v^n(0, y_j - 0.5h_y, \theta_k) \bar{c}_r^n(0, y_j - h_y, \theta_k)) + \frac{1}{2H(0, y_j) h_0} \cdot \\
 & \cdot (w_r^n(0, y_j, \theta_k + 0.5h_0) \bar{c}_r^n(0, y_j, \theta_k + h_0) - w_r^n(0, y_j, \theta_k - 0.5h_0) \bar{c}_r^n(0, y_j, \theta_k - h_0)) = \frac{1}{h_x^2} (\mu_{h,r}(0.5h_x, y_j, \theta_k) + \\
 & + \mu_{h,r}(-0.5h_x, y_j, \theta_k)) (\bar{c}_r^n(h_x, y_j, \theta_k) - \bar{c}_r^n(0, y_j, \theta_k)) - \mu_{h,r}(-0.5h_x, y_j, \theta_k) \frac{h_x}{3} \vartheta_1 + \frac{1}{h_y^2} (\mu_{h,r}(0, y_j + 0.5h_y, \theta_k) \cdot \\
 & \cdot (\bar{c}_r^n(0, y_j + h_y, \theta_k) - \bar{c}_r^n(0, y_j, \theta_k)) - \mu_{h,r}(0, y_j - 0.5h_y, \theta_k) (\bar{c}_r^n(0, y_j, \theta_k) - \bar{c}_r^n(0, y_j - h_y, \theta_k))) + \\
 & + \frac{1}{H^2(0, y_j) h_0^2} (\mu_{v,r}(0, y_j, \theta_k + 0.5h_0) (\bar{c}_r^n(0, y_j, \theta_k + h_0) - \bar{c}_r^n(0, y_j, \theta_k)) - \mu_{v,r}(0, y_j, \theta_k - 0.5h_0) \cdot \\
 & \cdot (\bar{c}_r^n(0, y_j, \theta_k) - \bar{c}_r^n(0, y_j, \theta_k - h_0))) + \bar{F}_r^n(0, y_j, \theta_k) \in \bar{\omega}^+, r=1,2,3, n=1, \dots, N_T.
 \end{aligned} \tag{90}$$

Погрешность аппроксимации схемы (90) в граничных узлах сетки $\bar{\omega}^+$ при $x_i = 0$ равна $O(\tau + h_x^2)$.

Для случая, когда выполнено граничное условие (11) и $x_i = L_i$, а также случаев граничных условий (12) и (13), методы построения разностной схемы для задачи (8)–(13) аналогичны тем, которые описаны выше, начиная с соотношения (43). В виду громоздкости их описания в рамках данной статьи они не приводятся.

Обсуждение и заключение. Предложена разностная схема второго порядка аппроксимации на равномерной сетке, которая приближает начально-краевую задачу для трехмерного уравнения диффузии-конвекции мультифракционных взвесей во всех узлах равномерной сетки, включая граничные узлы. Особое внимание уделено описанию методов аппроксимации в граничных узлах сетки с использованием расширенной сетки. Предложенная схема имеет погрешность аппроксимации в норме сеточного пространства S : второй — относительно шагов пространственной сетки и первый порядок точности относительно временного шага. Дальнейшие исследования связаны с доказательством устойчивости и сходимости построенной разностной схемы на основе сеточного принципа максимума при нежестких ограничениях на сеточное число Пекле, выполнении условия Куранта, указанных выше условий гладкости и других ограничениях, которые естественным образом выполняются для дискретных моделей гидрофизики прибрежных систем.

Список литературы / References

1. Сухинов А.И., Чистяков А.Е., Бондаренко Ю.С. Оценка погрешности решения уравнения на основе схем с весами. *Известия ЮФУ. Технические науки*. 2011;8(121):6–13.
Sukhinov A.I., Chistyakov A.E., Bondarenko Yu.S. Error estimation of the solution to the equation based on weighted schemes. *Izvestiya YUFU. Technical Sciences*. 2011;8(121):6–13. (in Russ.)
2. Сухинов А.И., Чистяков А.Е., Проценко Е.А. Построение дискретной двумерной математической модели транспорта наносов. *Известия ЮФУ. Технические науки*. 2011;8(121):32–44.
Sukhinov A.I., Chistyakov A.E., Protsenko E.A. Construction of a discrete two-dimensional mathematical model of sediment transport. *Izvestiya YUFU. Technical Sciences*. 2011;8(121):32–44. (in Russ.)
3. Сухинов А.И., Чистяков А.Е., Проценко Е.А., Сидорякина В.В., Проценко С.В. Параллельные алгоритмы решения задачи динамики изменения рельефа дна в прибрежных системах. *Вычислительные методы и программирование*. 2020;21(3):196–206. <https://doi.org/10.26089/NumMet.v21r318>
Sukhinov A.I., Chistyakov A.E., Protsenko E.A., Sidorakina V.V., Protsenko S.V. Parallel algorithms for solving the problem of dynamics of bottom relief changes in coastal systems. *Computational Methods and Programming*. 2020; 21(3):196–206. (in Russ.) <https://doi.org/10.26089/NumMet.v21r318>
4. Сухинов А.И., Чистяков А.Е., Проценко Е.А., Сидорякина В.В., Проценко С.В. Комплекс объединенных моделей транспорта наносов и взвесей с учетом трехмерных гидродинамических процессов в прибрежной зоне. *Математическое моделирование*. 2020;32(2):3–23. <https://doi.org/10.20948/mm-2020-02-01>
Sukhinov A.I., Chistyakov A.E., Protsenko E.A., Sidorakina V.V., Protsenko S.V. A complex of combined models for sediment and suspension transport considering three-dimensional hydrodynamic processes in the coastal zone. *Mathematical Modelling*. 2020;32(2):3–23. (in Russ.) <https://doi.org/10.20948/mm-2020-02-01>
5. Sukhinov A.I., Chistyakov A.E., Protsenko S.V., Sidoryakina V.V. Coupled 3D wave and 2D bottom deposit transportation models for the prediction of harmful phenomena in coastal zone. В сборнике: *Trends in the Analysis and Design of Marine Structures — Proceedings of the 7th International Conference on Marine Structures, MARSTRUCT 2019*. 2019. P. 597–603. <https://doi.org/10.1201/9780429298875-68>
6. Сухинов А.И., Сидорякина В.В. Построение и исследование корректности математической модели транспорта и осаждения взвесей с учетом изменений рельефа дна. *Computational Mathematics and Information Technologies*. 2018;2(2):76–90. <https://doi.org/10.23947/2587-8999-2018-2-76-90>
Sukhinov A.I., Sidoryakina V.V. Development and analysis of the correctness of a mathematical model for the transport and sedimentation of suspensions, taking into account changes in bottom relief. *Computational Mathematics and Information Technologies*. 2018;2(2):76–90. <https://doi.org/10.23947/2587-8999-2018-2-76-90>
7. Sukhinov A.I., Sukhinov A.A., Sidoryakina V.V. Uniqueness of solving the problem of transport and sedimentation of multicomponent suspensions in coastal systems. В сборнике: *Journal of Physics: Conference Series. Applied Mathematics, Computational Science and Mechanics: Current Problems*. Bristol, 2020;1479:012081. <https://doi.org/10.1088/1742-6596/1479/1/012081>
8. Sukhinov A.I., Sidoryakina V.V. Development and correctness analysis of the mathematical model of transport and suspension sedimentation depending on bottom relief variation. *Vestnik of Don State Technical University*. 2018;18(4): 350–361. <https://doi.org/10.23947/1992-5980-2018-18-4-350-361>
9. Сухинов А.И., Чистяков А.Е., Сидорякина В.В., Проценко С.В., Атаян А.М. Локально-двумерные схемы расщепления для параллельного решения трехмерной задачи транспорта взвешенного вещества. *Математическая физика и компьютерное моделирование*. 2021;24(2):38–53. <https://doi.org/10.15688/mpcm.jvolsu.2021.2.4>
Sukhinov A.I., Chistyakov A.E., Sidoryakina V.V., Protsenko S.V., Atayan A.M. Locally two-dimensional splitting schemes for parallel solving of the three-dimensional problem of suspended substance transport. *Mathematical Physics and Computer Simulation*. 2021;24(2):38–53. (in Russ.) <https://doi.org/10.15688/mpcm.jvolsu.2021.2.4>
10. Сидорякина В.В., Сухинов А.И. Построение и исследование близости решений в L2 двух краевых задач для модели переноса многокомпонентных взвесей в прибрежных системах. *Журнал вычислительной математики и математической физики*. 2023;63(10):1721–1732. <https://doi.org/10.1134/S0965542523100111>
Sidoryakina V.V., Sukhinov A.I. Construction and analysis of the proximity of solutions in L2 for two boundary problems in the model of multicomponent suspension transport in coastal systems. *Journal of Computational Mathematics and Mathematical Physics*. 2023;63(10):1721–1732. (in Russ.) <https://doi.org/10.1134/S0965542523100111>
11. Курант Р. *Уравнения с частными производными*. Москва: МИП; 1964. 832 с.
Courant R. *Partial Differential Equations*. Moscow: MIR; 1964. 832 p. (in Russ.)

Об авторе:

Валентина Владимировна Сидорякина, доцент кафедры математики и информатики, Донской государственной технической университет (344003, Российская Федерация, г. Ростов-на-Дону, пл. Гагарина, 1), кандидат физико-математических наук, [MathSciNet](#), [Spin-код](#), [ORCID](#), [ResearcherID](#), [ScopusID](#), cvv9@mail.ru

Конфликт интересов: автор заявляет об отсутствии конфликта интересов.

Автор прочитал и одобрил окончательный вариант рукописи.

About the Author:

Valentina V. Sidoryakina, Associate Professor of the Department of Mathematics and Computer Science, Don State Technical University (1, Gagarin Sq., Rostov-on-Don, Russian Federation, 344003), Candidate of Physical and Mathematical Sciences, [MathSciNet](#), [Spin-code](#), [ORCID](#), [ResearcherID](#), [ScopusID](#), cvv9@mail.ru

Conflict of Interest Statement: the author declares no conflict of interest.

The author has read and approved the final version of manuscript.

Поступила в редакцию / Received 19.08.2024

Поступила после рецензирования / Reviewed 02.09.2024

Принята к публикации / Accepted 02.09.2024