Воронежский государственный университет
Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова
Математический институт им. В. А. Стеклова
Российской академии наук

ВОРОНЕЖСКАЯ ЗИМНЯЯ МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ШКОЛА С.Г. КРЕЙНА – 2024

Материалы международной Воронежской зимней математической школы, посвященной памяти В. П. Маслова

(26–30 января 2024 г.)

Воронеж
Издательский дом ВГУ
2024

УДК 517.53(97; 98)
ББК 22.16
С56

Конференция поддержана МЦМУ МИАН, Московским и Воронежским госуниверситетами

Программный комитет:

А. Т. Фоменко (председатель), С. Ю. Доброхотов (зам.пред.), В. В. Ведюшкина, Ю. П. Вирченко, В. Г. Данилов, В. А. Кибкало, И. С. Ломов, Д. С. Миненков, А. Б. Муравник, Э. М. Мухамадиев, В. Е. Назайкинский, В. В. Обуховский, С. И. Пискарев, С. Г. Пятков, Н. Р. Раджабов, В. И. Ряжских, К. Б. Сабитов, А. Л. Скубачевский, А. П. Солдатов, В. Е. Фёдоров, А. С. Бондарев (ученый секретарь)

Оргкомитет:

Д. А. Ендовицкий (председатель), А. И. Шафаревич, В. А. Костин (сопредседатели), М. Ш. Бурлуцкая, Д. В. Костин, Е. М. Семенов (заместители председателя), Ю. А. Алхутов, Ю. Е. Гликлих, А. В. Глушко, В. Г. Звягин, М. И. Каменский, А. И. Кожанов, С. В. Корнев, Л. Н. Ляхов, В. П. Орлов, А. Ю. Савин, Т. Н. Фоменко, Б. Н. Хабибуллин, Р. С. Юлмухамедов

С56 **Воронежская зимняя математическая школа С. Г. Крейна – 2024** : материалы международной Воронежской зимней математической школы, посвященной памяти В. П. Маслова (26–30 января 2024 г.) / Воронежский государственный университет ; Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова ; Математический институт им. В. А. Стеклова РАН . — Воронеж : Издательский дом ВГУ, 2024. — 314 с.

ISBN 978–5–9273–3692–0

В сборнике представлены материалы докладов и лекций, включенных в программу Воронежской зимней математической школы, проводимой Воронежским госуниверситетом совместно с Московским государственным университетом им. М. В. Ломоносова, Математическим институтом им. В. А. Стеклова РАН. Тематика охватывает широкий спектр проблем теорий функций, функционального анализа, дифференциальных уравнений, уравнений математической физики, нелинейного анализа, геометрии, топологии, математического моделирования и истории математики.

УДК 517.53(97; 98)
ББК 22.16

© Воронежский государственный университет, 2024
© Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, 2024
© Математический институт им. В. А. Стеклова РАН, 2024
© Оформление. Издательский дом ВГУ, 2024

ISBN 978–5–9273–3692–0

ствует $\mu^* > 0$ такое, что для всех $\mu \in (0, \mu^*]$ функции

$$x^2(t) = \xi(t) + \mu H_0^0(t)\eta(\tfrac{t-t_0}{\mu}) + \mu H_1^0(t)\eta(\tfrac{t-h-t_0}{\mu}),\ t \in T,$$
$$y^2(t) = (E_{n_2} - \mu L_0^0(t)H_0^0(t))\eta(\tfrac{t-t_0}{\mu}) - \left(L_0^0(t) + \mu L_0^1(t)\right)\xi(t) -$$
$$-\mu L_0^0(t)H_1^0(t)\eta(\tfrac{t-t_0-h}{\mu}) - \mu L_1^1(t)\xi(t-h),\ t \in T,$$

являются равномерными асимптотическими аппроксимациями 2-го порядка решения задачи (1). Здесь $\xi(t), \eta(t)$ – решения задачи

$$\dot{\xi}(t) = \mathbf{A}_\xi(t, \mu, e^{-ph})\xi(t) + \mathbf{F}_{\xi 0}(t, \mu, e^{-ph}),\ \xi \in \mathbf{R}^{n_1},$$
$$\mu\dot{\eta}(t) = \mathbf{A}_\eta(t_0, \mu, e^{-ph})\eta(t) + \mathbf{F}_{\eta 0}(t, \mu, e^{-ph}),\ \eta \in \mathbf{R}^{n_2},\ t \in T,$$
$$\xi(\theta, \mu) = \varphi(\theta) - \mu H_0^0(\theta)(\psi(\theta) + L_0^0(\theta)\varphi(\theta)),\ \theta \leqslant t_0,$$
$$\eta(\theta, \mu) = \psi(\theta) + (L_0^0(\theta) + \mu L_0^1(\theta))\varphi(\theta),\ \theta \leqslant t_0,$$
$$\varphi(\theta) \equiv 0, \psi(\theta) \equiv 0,\ \theta < t_0 - h,$$

где $\mathbf{F}_{s0}(t, \mu, e^{-ph})$, $s \in \{\xi, \eta\}$, — функции, выраженные через (2) и $\varphi(\theta), \psi(\theta), \theta \in T_h$, $\mathbf{A}_{\xi 0}(t, \mu, e^{-ph}) = \sum\limits_{j=0}^{2} A_{\xi j}(t, \mu)e^{-jph}$, $\mathbf{A}_\eta(t_0, \mu, e^{-ph}) = \sum\limits_{j=0}^{1} A_{\eta j}(t_0, \mu)e^{-jph}$, $A_{\xi j}(t, \mu)$, $j = 0, 1, 2$, $A_{\eta i}(t_0, \mu)$, $i = 0, 1$, – матричные функции, выраженные через матричные функции (2).

Литература

1. Glizer V. Singularly perturbed linear time delay systems / V. Glizer. — Birkhauser, Cham, 2021.

2. Tsekhan O. Approximation of the solution based on the decoupling transformation of linear time-varying singularly perturbed system with delay / O. Tsekhan // Tchemisova T.V., Torres D.F.M., Plakhov A.Y. (eds). Dynamic Control and Optimization. DCO 2021. Springer Proceed. in Math. & Stats. Springer, Cham. — 2022. — Vol. 407 — P. 77—97.

3. Марченко, В. М. Реализация динамических систем в шкалах систем с последействием: I. Реализуемость / В.М. Марченко, Ж.-Ж. Луазо // Диф. уравнения. — 2006. — Т. 42, № 11. — С. 1515–1523.

4. Хейл Дж. Теория функционально-дифференциальных уравнений: Пер. с англ. / Дж. Хейл. — М.: Мир, 1984.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ГАЗОВОЙ СМЕСИ С ГРАФЕНОВОЙ ПОВЕРХНОСТЬЮ[1]

А.С. Челнокова, А.М. Бубенчиков (Томск, ТГУ)

smolina-nyuta@mail.ru

[1] Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (проект № 19-71-10049 П).

© Челнокова А.С., Бубенчиков А.М., 2024

В этом исследовании мы предлагаем простую и эффективную математическую модель взаимодействия компонент газовой смеси с одиночными включениями макромолекул и графеновой стенкой.

Пусть в некотором представительном объеме газовой среды, взятом в абсолютной системе координат $Ox^1x^2x^3$, находятся N частиц газа одной компоненты, $M-N$ частиц второй компоненты, одна грань представительного объема выполнена из графена, имеющего $K-M$ атомов углерода, и крупная макромолекула, например фуллерен, состоящий из $L-K$ атомов углерода. Тогда уравнения движения частиц 1-ой компоненты будут иметь вид:

$$m_1 \frac{dv_i^l}{dt} = -\sum_{k=1,k\neq i}^{N} \frac{\partial U_{11}(\rho_i k)}{\partial x_k^l} - \sum_{k=N+1}^{M} \frac{\partial U_{12}(\rho_i k)}{\partial x_k^l} - \\ - \sum_{k=M+1}^{L} \frac{\partial U_{13}(\rho_{ik})}{\partial x_k^l}, i = 1, ..., N, l = 1, 2, 3.$$

Здесь v_i^l — проекции скорости i-ой частицы 1-ой компоненты газа на l-ую ось координат; m_1 —масса частицы газа 1-ой компоненты; U_{11} — потенциал парных взаимодействий для частиц 1-ой компоненты газа; U_{12} — потенциал взаимодействия частиц 1-ой и 2-ой компонент; U_{13} — потенциал взаимодействия частиц 1-ой компоненты с атомами углерода в имеющихся структурах; x_k^l — декартовы координаты k-ой частицы на l-ую ось координат; $\rho = \sqrt{\sum_{l=1}^{3}(x_i^l - x_k^l)^2}$ — расстояние между двумя силовыми центрами.

Аналогично можно записать уравнения движения частиц второй компоненты газа для $i = N+1, ..., M$.

Если в газе присутствуют включения крупных макромолекул, то для них необходимо также записать уравнения для движения их центров масс:

$$m_f \frac{dv_c^l}{dt} = -\sum_{i=K+1}^{L} \left(\sum_{k=1}^{N} \frac{\partial U_{13}(\rho_i k)}{\partial x_k^l} + \sum_{k=N+1}^{M} \frac{\partial U_{23}(\rho_i k)}{\partial x_k^l} + \sum_{k=M+1}^{K} \frac{\partial U_{33}(\rho_i k)}{\partial x_k^l} \right).$$

Здесь m_f — масса фуллерена; v_c^l — проекция скорости центра масс фуллерена на l-ую ось координат, $l = 1, 2, 3$.

Представленные дифференциальные уравнения должны замыкаться кинематическими соотношениями при наличии начальных данных.

Следует отметить, что фуллерен достаточно крупная молекула и кинетическая энергия его вращений может превосходить кинетическую энергию его же трансляционных движений. Поэтому следует записать уравнения вращательного движения фуллерена:

$$\frac{d}{dt}\left(\sum_{k=1}^{3} A_k^l \omega_{x^l}\right) = L_{x^l}, l = 1, 2, 3.$$

Здесь A_k^l — компоненты тензора инерции, которые в процессе численных расчетов вычисляются для каждого k-ого силового центра в абсолютной системе координат; ω_{x^l} — компоненты вектора мгновенной угловой скорости ω; L_{x^l} — проекции моментов сил, действующих на фуллерен, на l-ую ось координат.

Следуя теореме сложения скоростей для каждого атома фуллерена можем записать: $v_k = v_c + \omega \times r_k$

Тогда координаты атомов фуллерена найдутся из кинематического соотношения $\frac{dr_k}{dt} = v_k$, где r_k — радиус вектор положения k-ого атома углерода в фуллерене, а v_k — его вектор скорости.

Расчеты по описанной модели показали, что в термодинамически равновесных условиях как трансляционная, так и энергия вращений фуллерена испытывают длительные и непериодические изменения. Если энергетическое состояние крупной углеродной молекулы определять в температурных единицах, то амплитуда этих изменений составляет величину порядка 20 K. При этом средне арифметическая величина этих энергий близка к термодинамически равновесной температуре системы.

Также результаты численного моделирования позволяют определить диффузионный перенос фуллереновых частиц в двухкомпонентной смеси газов, например He/N_2 и дать оценки по сорбционным свойствам неподвижной моноатомной поверхности графена.

О РЕШЕНИИ НАЧАЛЬНО-КРАЕВЫХ ЗАДАЧ ДЛЯ ДИФФЕРЕНЦИНО-АЛГЕБРАИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ В ЧАСТНЫХ ПРОИЗВОДНЫХ МЕТОДОМ НАИМЕНЬШИХ КВАДРАТОВ

В.Ф. Чистяков (Иркутск, ИДСТУ СО РАН)
chist@icc.ru

© Чистяков В.Ф., 2024