

Поиск устойчивого состояния сплошной среды с нелокальным взаимодействием в зависимости от потенциала взаимодействия с помощью метода асимптотической динамики

Анатолий А. Садков, Василий Н. Попов

Аннотация — Рассматриваются вопросы моделирования пространственных конфигураций сплошной среды в нескольких устойчивых состояниях взаимодействие между пространственно-удаленными элементами которых характеризуется потенциальной энергией пропорциональной массам элементов и потенциалу взаимодействия, зависящего только от расстояния между элементами.

Исследование уравнения равновесия сплошной среды позволяет сформировать алгоритм математической модели для формирования детализированных данных о плотности сплошной среды в различных фазовых состояниях. В зависимости от значения преобразования Фурье $\tilde{\varphi}(p_0)$ потенциала взаимодействия в точке минимума, а также в соответствии со свойствами одномерной сплошной среды, плотность среды принимает соответствующее фазовое состояние. Основа выбора численных методов решения задачи по заданному алгоритму существенно влияет на точность поиска детализированных данных, «узкими» местами в данном алгоритме являются расчет значений интеграла, где происходит выбор того или иного метода поиска значений в узлах сетки для формирования итогового результирующего значения или набора значений.

Расчет детализированных данных по сформулированному алгоритму был сделан в среде разработки программного обеспечения Microsoft Visual Studio 2017, а сам алгоритм описан с помощью языка программирования C++. Для графической визуализации решения, были использованы программные приложения Maple. Для точности расчета итоговых детализированных данных с точностью до пяти знаков после запятой для поиска значения интеграла использовался метод Симпсона.

Ключевые слова — сплошная среда, устойчивое состояние среды, преобразование Фурье.

I. ВВЕДЕНИЕ

Фазовые переходы – один из необычных и теоретически малоизученных процессов, приводящий к резким изменениям свойств вещества при незначительных изменениях некоторых его параметров (температуры, давления и т. п.). В результате фазового перехода вещества переходят из одного устойчивого состояния – фазы, в другое. Одним из простейших примеров фазовых переходов является изменение агрегатного состояния воды под влиянием температуры: при температуре немного выше нуля вода представляет собой жидкость, но, при ее снижении – она кристаллизуется. Таким образом, небольшое изменение температуры вызывает резкое изменение структуры вещества.

В данной работе построена модель фазовых переходов в веществах, которые могут рассматриваться, как одномерные сплошные среды, взаимодействие между пространственно-удаленными элементами характеризуется потенциальной энергией

$$dU = \varphi(r) dm dm', \quad (1)$$

пропорциональной массам элементов dm, dm' и потенциалу взаимодействия $\varphi(r)$, зависящего только от расстояния r между элементами. При определенных видах потенциала $\varphi(r)$ такие среды способны находиться в состояниях равновесия с неоднородной конфигурацией распределения вещества [1].

Основой для исследования физико-математических процессов сплошных сред, являются технологии, описывающие с максимальной точностью свойств системы. Исследование таких процессов приводит к детальному моделированию состояния материальной среды. Задача создания модели материальной среды приводит к необходимости многомасштабного моделирования процессов синтеза материала с заданными свойствами и возможностями управления микроструктурой материала на уровне молекул и атомов.

Начала работы в данной области описано в работах ученых: Пальмов В.А., Седов Л. И., Кунин И.А., Ильющин А.А., Ломакин В. А. [6, 8, 4, 3], рассмотрение же пространственных конфигураций, описывающих

Статья получена 5 мая 2021. Работа представляет собой результат научного исследования по тематике диссертации.

Садков Анатолий Александрович – аспирант Северного (Арктического) федерального университета имени М.В. Ломоносова (e-mail: himikus10@gmail.com).

Попов Василий Николаевич - д.ф.-м.н., профессор Северного (Арктического) федерального университета имени М.В. Ломоносова (e-mail: v.popov@narfu.ru).

различные устойчивые состояния сплошной среды рассматривается в работах Боднагар М., Леверентс А., Чокский Р., Томашевский И. Л. [1, 5, 2, 9], которые использовали различные аналитические и вычислительные методы для создания численных результатов описывающих положение точек среды, т.е. ее пространственную конфигурацию.

Цель данного исследования – исследование уравнения равновесия сплошной среды для поиска возможности нахождения среды в нескольких устойчивых состояниях.

Научная значимость ожидаемых результатов проекта определяется необходимостью разработки новых нелинейных математических моделей, более точно описывающих реально происходящие процессы, и методов их исследования. Предполагается, что при выполнении проекта будут использоваться новые методы аналитического решения интегро-дифференциальных уравнений. Область применения теории молекулярной динамики позволяет сформировать набор правил и законов, использование которых зависит непосредственно от численных методов и технических средств.

Практическая значимость ожидаемых результатов определяется возможными приложениями исследуемых нелинейных математических моделей в гидродинамических задачах современной физики, гидродинамики, медицины и ряда других разделов науки.

II. МЕТОДОЛОГИЯ ИССЛЕДОВАНИЯ УРАВНЕНИЯ РАВНОВЕСИЯ СПЛОШНОЙ СРЕДЫ С НЕЛОКАЛЬНЫМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ

Основным инструментом в исследовании служит Сплошные среды представляют собой удобный инструмент приближенного описания реальных дискретных объектов в масштабах, содержащих большое количество формирующих их однотипных элементов. Они успешно используются при моделировании не только жидких, твердых и газообразных веществ, но и биологических скоплений, таких как косяки рыб, стаи птиц и т. п. [1]. Такие скопления могут оказывать влияние на экологическую динамику, динамику распространения вирусов и в наибольшем масштабе – на эволюцию [1].

Важной особенностью сплошных сред с нелокальным взаимодействием вида (1) является их способность находиться в состояниях равновесия с неоднородной плотностью вещества [1]. В этих состояниях суммарное воздействие всех элементов среды на каждый отдельный элемент равно нулю. Учитывая потенциальный характер взаимодействия (по определению производная от потенциала равна силе взаимодействия), уравнение равновесия можно записать в виде

$$-dm \int_{R_3} \vec{\nabla} \varphi(|\vec{r} - \vec{r}'|) dm' = 0 \quad \forall \vec{r} \in R_3. \quad (2)$$

Обозначив через $\mu(\vec{r})$ плотность среды в точке \vec{r} , уравнение (2) можно переписать в виде

$$\mu(\vec{r}) \int_{R_3} \vec{\nabla} \varphi(|\vec{r} - \vec{r}'|) \mu(\vec{r}') d^3\vec{r}' = 0 \quad \forall \vec{r} \in R_3. \quad (3)$$

Перейдя к одномерному случаю взаимодействия элементов получим следующий результат:

$$\mu(x) \int_R \varphi'(|x - y|) \mu(y) dy = 0 \quad \forall x \in R. \quad (4)$$

Решение данного уравнения соответствует равновесному распределению среды.

В общем случае решение уравнения равновесия среды (2) не получить, более того, не доказано даже существование такого решения. Поэтому в ряде работ [1, 2, 3, 4, 5, 6, 8, 9] были рассмотрены некоторые частные случаи этого уравнения и использованы различные подходы к его решению и исследованию.

Так, в [1] приведено доказательство существования решения уравнения равновесия для потенциалов, удовлетворяющих условиям

$$\begin{cases} \int_R |\varphi(x)|(1+|x|)dx < \infty; \\ \int_{|x|>1} (|\varphi'(x)| + |\varphi''(x)|)dx < \infty; \\ \varphi(x) = \varphi_{reg}(x) + K(x)_+, \text{ где } (x)_+ = \begin{cases} 0, \text{ если } x < 0, \\ x, \text{ если } x > 0; \end{cases} \\ \varphi_{reg} \in C^2(R) \cap C^3(R \setminus \{0\}); \\ |\varphi'_{reg}(x) + |\varphi''_{reg}(x) + \int_R \varphi'''_{reg}(x)dx < \infty; \end{cases} \quad (5)$$

где $K < 0$, выполняется условие симметрии $\varphi(x) = \varphi(-x)$ и существует $\beta > 0$ такое, что $\varphi''(x) > 0$ для $x \in (0; 2\beta]$. Для таких случаев доказано, что существует интервал $I \subset R$ и функция $\bar{\mu} \in L^2(I) \cap L^1(I)$, которая является решением исходного уравнения равновесия среды (4).

Асимптотической динамика – один из более точных подходов к нахождению равновесных состояний сплошных сред описанный в [5]. Он основывается на рассмотрении движения сплошной среды как некоторой вязкой субстанции, в которой скорость движения $v(x)$ любого ее элемента пропорциональна интенсивности силы, действующей на этот элемент в точке x (т.е. силе (4), действующей на единичную массу, помещенную в точку x):

$$v(x) = - \int_R \varphi'(x - y) \mu(y, t) dy, \quad (6)$$

В качестве уравнения движения рассматривается уравнение непрерывности среды:

$$\frac{\partial \mu}{\partial t} + \frac{\partial j}{\partial x} = 0, \quad (7)$$

где μ – плотность среды;

$j = \mu \cdot v$ – поток элементов среды;

t – время.

Равенство (7) с учетом (6), принимает вид

$$\frac{\partial \mu(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu(x, t) \int_R \varphi'(x - y) \mu(y, t) dy \right). \quad (8)$$

Причем $\frac{\partial \mu}{\partial t} \rightarrow 0$ при $t \rightarrow \infty$ [1]. То есть при достаточно большом промежутке времени первое слагаемое в формуле (7) стремится к нулю. Тогда уравнение примет вид

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\mu(x, t) \int_R \varphi'(x - y) \mu(y, t) dy \right) \rightarrow 0, \text{ при } t \rightarrow \infty.$$

Отсюда следует

$$\mu(x, t) \int_R \varphi'(x - y) \mu(y, t) dy \rightarrow const.$$

Асимптотическое поведение решений уравнения (8) для потенциалов Морзе с различными параметрами F и

L показано на рисунке 1 (слева – графики потенциалов, справа – соответствующее им асимптотическое поведение).

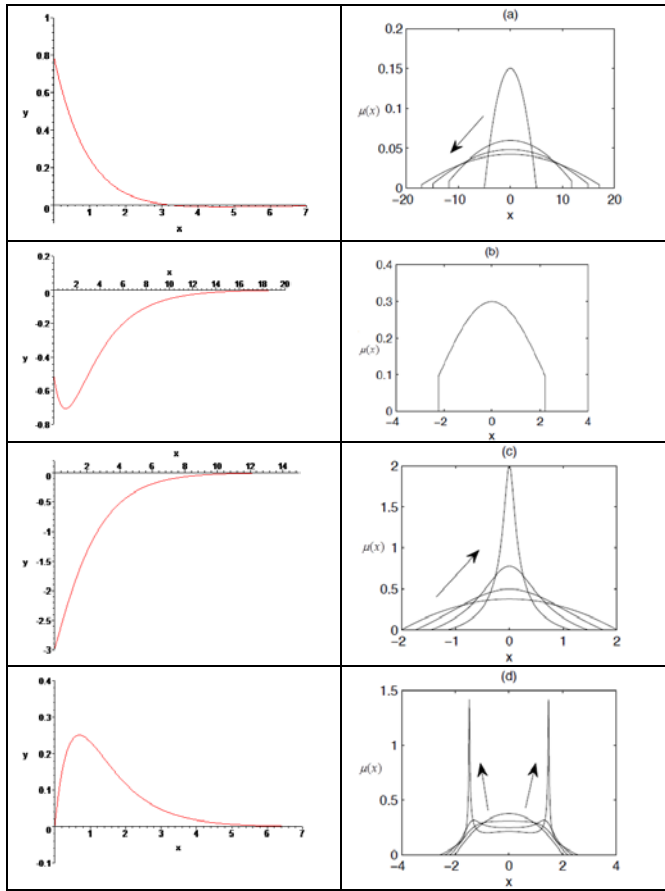


Рис. 1. – Асимптотическое поведение для случая потенциала Морзе с различными параметрами F и L: (a) F=0,1, L=2; (b) F=0,5, L=3; (c) F=2, L=2; (d) F=2, L=0,5

III. Поиск устойчивого состояния сплошной среды с нелокальным взаимодействием в зависимости от значения преобразования Фурье

Общее уравнение равновесия (4) может быть упрощено в случае, когда плотность среды положительна во всех точках, за исключением множества точек нулевой меры. В этом случае уравнение (4) можно переписать в виде

$$\int_R \varphi'(|x-y|) \mu(y) dy = 0 \quad \forall x \in R. \quad (9)$$

Предполагая, что $\mu(x)$ – ограниченная непрерывная функция, $\varphi(x)$ – функция, абсолютно интегрируемая вместе со своими первыми производными, к левой и правой частям полученного равенства можно применить преобразование Фурье. Оно приводит к уравнению [9]

$$p \tilde{\varphi}(p) \tilde{\mu}(p) = 0 \quad \forall p \in R,$$

где $\tilde{\varphi}(p)$ – преобразование функции потенциала взаимодействия

$$\tilde{\varphi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \varphi(|x|) e^{ipx} dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \varphi(|x|) \cos px dx; \quad (10)$$

$\tilde{\mu}(p)$ – преобразование функции плотности среды

$$\tilde{\mu}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \mu(x) e^{ipx} dx. \quad (11)$$

Решение последнего уравнения имеет следующий вид:

$$\tilde{\mu}(p) = \tilde{\mu}_0 \delta(p) + \sum_{p_k > 0} (\tilde{\mu}_k^{(1)} \delta(p - p_k) + \tilde{\mu}_k^{(2)} \delta(p + p_k)), \quad (12)$$

где $\tilde{\mu}_0, \tilde{\mu}_k^{(1)}, \tilde{\mu}_k^{(2)}$ – константы;

$\delta(p)$ – дельта-функция Дирака;

$\{p_k\}$ неотрицательные корни $\tilde{\varphi}(p)$ (т.к. $\tilde{\varphi}(p)$ четная функция, то $\{-p_k\}$ также корни этой функции).

Применив обратное преобразование Фурье, можно получить искомую равновесную плотность

$$\mu(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \tilde{\mu}(p) e^{-ipx} dp. \quad (13)$$

Тогда, подставив (12) в (13), получим

$$\mu(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left\{ \tilde{\mu}_0 \delta(p) + \sum_{p_k > 0} (\tilde{\mu}_k^{(1)} \delta(p - p_k) + \tilde{\mu}_k^{(2)} \delta(p + p_k)) \right\} e^{-ipx} dp \quad (14)$$

Учитывая свойство дельта-функции

$$\int \delta(p - p^*) f(p) dp = f(p^*), \quad (15)$$

получаем

$$\mu(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left(\tilde{\mu}_0 + \sum_{p_k > 0} (\tilde{\mu}_k^{(1)} e^{-ip_k x} + \tilde{\mu}_k^{(2)} e^{ip_k x}) \right), \quad (16)$$

где $\tilde{\mu}_0, \tilde{\mu}_k^{(1)}, \tilde{\mu}_k^{(2)}$ – константы.

Так как распределение плотности в среде соответствует вещественной функции, $\tilde{\mu}_k^{(1)}, \tilde{\mu}_k^{(2)}$ должны быть такими, чтобы функция $\mu(x)$ оставалась вещественной. Такое возможно только в случае, когда $\tilde{\mu}_k^{(1)}$ и $\tilde{\mu}_k^{(2)}$ – комплексно сопряженные числа, то есть комплексные числа вида

$$\tilde{\mu}_k^{(1)} = c_k e^{i\varphi_k}, \quad \tilde{\mu}_k^{(2)} = c_k e^{-i\varphi_k}.$$

Далее, применив формулу Эйлера, получаем

$$\begin{aligned} \mu(x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left(\tilde{\mu}_0 + \sum_{p_k > 0} 2c_k \cos(p_k x - \varphi_k) \right) = \\ &= \mu_0 + \sum_{p_k > 0} \mu_k \cos(p_k x - \varphi_k), \end{aligned} \quad (17)$$

где

$$\mu_0 = \frac{\tilde{\mu}_0}{\sqrt{2\pi}}; \quad \mu_k = \frac{2c_k}{\sqrt{2\pi}}.$$

Учитывая это и предполагая, что малым изменениям потенциала взаимодействия соответствуют малые изменения плотности среды, приходим к следующим выводам:

1) плотность остается периодической функцией с периодом $T_* = 2\pi / p_*$, близким к $T_0 = 2\pi / p_0$:

$$\mu(x) = \mu_0 + \mu_1 \cos p_* x + \sum_{k=2}^{\infty} \mu_k \cos(p_* k x); \quad (18)$$

2) области, в которых плотность становится равной нулю, находятся вблизи нулей функции, т.е. имеют вид:

$$\left[\frac{\pi - \delta + 2\pi n}{p_*}, \frac{\pi + \delta + 2\pi n}{p_*} \right], \quad n \in Z,$$

где δ – некоторая положительная величина;

3) область, в которой $\mu(x) > 0$, имеет вид

$$\Omega_+ = \bigcup_{n=-\infty}^{\infty} \left[\frac{-\pi + \delta + 2\pi n}{p_*}, \frac{\pi - \delta + 2\pi n}{p_*} \right].$$

Кроме того, плотность среды должна удовлетворять уравнению равновесия (4)

$$\mu(x) \int \varphi'(|x-y|) \mu(y) dy = 0 \quad \forall x \in R,$$

из которого следует

$$\int_R \varphi'(|x-y|) \mu(y) dy = 0, \quad x \in \Omega_+ . \quad (19)$$

Подставив (18) в (19), получим следующее выражение

$$\int_R \varphi'(|x-y|) (\mu_0 + \mu_1 \cos p_* y + \sum_{k=2}^{\infty} \mu_k \cos(p_* k y)) dy = 0, \quad x \in \Omega_+ .$$

Используя формулу Эйлера

$$\cos p_* x = \frac{e^{ip_* x} + e^{-ip_* x}}{2}; \quad \sin p_* x = \frac{e^{ip_* x} - e^{-ip_* x}}{2i},$$

следующее справедливое равенство

$$\int_R \varphi'(z) e^{-ip_* z} dz = ip_* \tilde{\varphi}(p)$$

и, сделав замену переменных $z=x-y$, получим

$$\int_R \varphi'(z) \mu_0 dz + \frac{1}{2} \mu_1 (e^{ip_* x} ip_* \tilde{\varphi}(p_*) - e^{-ip_* x} ip_* \tilde{\varphi}(p_*)) + \frac{1}{2} \sum_{k=2}^{\infty} (\mu_k e^{ip_* k x} ip_* \tilde{\varphi}(p_*) - \mu_k e^{-ip_* k x} ip_* \tilde{\varphi}(p_*)) = 0, \quad x \in \Omega_+ . \quad (20)$$

Применив еще раз формулу Эйлера, и, учитывая, что $\varphi(z) \rightarrow 0$, при $z \rightarrow \pm\infty$,

уравнение (20) можно переписать в следующем виде

$$\sum_{k=1}^{\infty} p_* k \tilde{\varphi}(kp_*) \mu_k \sin(kp_* x) = 0, \quad x \in \Omega_+ . \quad (21)$$

Таким образом:

$$F(x) \equiv \sum_{k=1}^{\infty} p_* k \tilde{\varphi}(kp_*) \mu_k \sin(kp_* x) = 0, \quad x \in \Omega_+ . \quad (22)$$

Если $x \notin \Omega_+$, то условие (22) может не выполняться.

Из (22) следует

$$F'(x) = \sum_{k=1}^{\infty} p_*^2 k^2 \tilde{\varphi}(kp_*) \mu_k \cos(kp_* x) = 0, \quad x \in \Omega_+$$

или

$$p_*^2 \tilde{\varphi}(p_*) \mu_1 \cos(p_* x) + \sum_{k=2}^{\infty} p_*^2 k^2 \tilde{\varphi}(kp_*) \mu_k \cos(kp_* x) = 0, \quad x \in \Omega_+ . \quad (23)$$

Рассмотрим случай, когда $\tilde{\varphi}(p) = \frac{\alpha}{p^2}$ для любых

$p \geq 2p_*$. В этом случае получим

$$p_*^2 \tilde{\varphi}(p_*) \mu_1 \cos(p_* x) + \sum_{k=2}^{\infty} \alpha \mu_k \cos(kp_* x) = 0, \quad x \in \Omega_+ . \quad (24)$$

Выразим из (24) сумму и подставим в (18), получим

$$\mu(x) = \begin{cases} \mu_0 + \mu_1 \cos p_* x - \frac{1}{\alpha} p_*^2 \tilde{\varphi}(p_*) \mu_1 \cos(p_* x), & x \in \Omega_+; \\ 0, & x \notin \Omega_+ . \end{cases}$$

или, вводя обозначение $\varepsilon \equiv -\frac{\tilde{\varphi}(p_*) p_*^2}{\alpha}$,

$$\mu(x) = \begin{cases} \mu_0 + \mu_1 (1 + \varepsilon) \cos(p_* x), & x \in \Omega_+; \\ 0, & x \notin \Omega_+; \end{cases} \quad (25)$$

здесь μ_0 – заданное среднее значение плотности среды. Остается найти коэффициент μ_1 и величину δ , определяющую область Ω_+ .

Таким образом, распределение среды определяется с одной стороны, уравнением (25), а с другой, уравнением (18). Тогда коэффициенты разложения в ряд Фурье (25) и (18) будут равны. Найдем коэффициенты разложения в ряд Фурье для (25). Для коэффициента μ_0 получим:

$$\mu_0 = \frac{1}{T} \int_{-T/2}^{T/2} \mu(x) dx = \frac{1}{2\pi / p_*} \int_{-\pi+\delta}^{\pi-\delta} (\mu_0 + \mu_1 (1 - \varepsilon) \cos p_* x) dx.$$

Вычисление этого интеграла приводит к следующему результату

$$\mu_0 = \mu_0 \frac{(\pi - \delta)}{\pi} + \mu_1 \frac{(1 + \varepsilon)}{\pi} \sin \delta. \quad (26)$$

Выразим теперь коэффициент μ_1

$$\mu_1 = \frac{2}{T} \int_{-T/2}^{T/2} \mu(x) \cos x dx = \frac{1}{\pi / p_*} \int_{-\pi+\delta}^{\pi-\delta} (\mu_0 \cos p_* x + \mu_1 (1 + \varepsilon) \cos^2 p_* x) dx.$$

Вычисление этого интеграла приводит к следующему результату

$$\mu_1 = \mu_0 \frac{2 \sin \delta}{\pi} + \mu_1 (1 + \varepsilon) \frac{2(\pi - \delta) - \sin 2\delta}{2\pi}. \quad (27)$$

Коэффициент μ_1 можно выразить через μ_0 следующим образом (26).

$$\mu_1 = \mu_0 \frac{\delta}{(1 + \varepsilon) \sin \delta} \quad (28)$$

Подставляя (28) в (27), получим уравнение для неизвестной величины δ :

$$\frac{\pi \varepsilon}{1 + \varepsilon} = \delta + \frac{\sin 2\delta}{2} - 2 \frac{\sin^2 \delta}{\delta}.$$

Видим, что левая часть последнего уравнения зависит только от ε , которое, в свою очередь, зависит только от $\tilde{\varphi}(p_*)$, а правая часть зависит только от δ . Разложив правую часть в ряд Тейлора, пренебрегая слагаемыми выше пятой степени, получим

$$\frac{2}{45} \delta^5 = \frac{\pi \varepsilon}{1 + \varepsilon}$$

или, считая ε пренебрежимо малой величиной

$$\delta = \sqrt[5]{\frac{45}{2} \pi \varepsilon}. \quad (29)$$

Данное уравнение характеризует зависимость длины интервалов с нулевой плотностью от значения ε – величины, характеризующей положение точки минимума преобразования Фурье потенциала взаимодействия в точке p_* . На рисунке 2 представлен график этой зависимости.

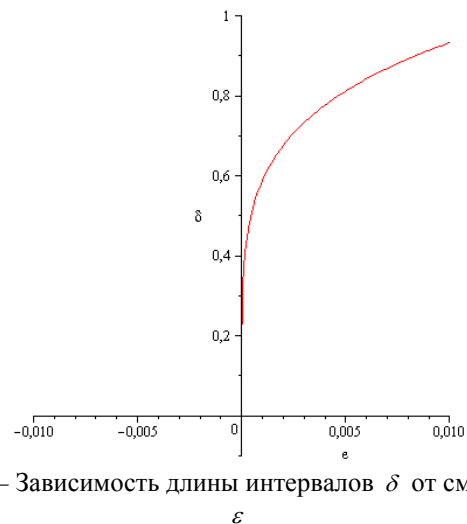


Рис. 2 – Зависимость длины интервалов δ от смещения ε

Из графика видно, что при $\varepsilon \leq 0$ (т.е. при $\tilde{\varphi}(p_*) \geq 0$) разрывов нет ($\delta = 0$), при $\varepsilon > 0$ (при $\tilde{\varphi}(p_*) < 0$) появляется разрыв, причем

$$\frac{d}{d\varepsilon} \delta(\varepsilon) \rightarrow \infty \text{ при } \varepsilon \rightarrow 0 .$$

Хотя функция $\delta(\varepsilon)$ и является непрерывной, такое ее

поведение отражает скачкообразный характер фазового перехода от равномерного распределения вещества к кристаллическому.

IV. РЕЗУЛЬТАТЫ

Используя (25), (28) и (29), можем построить график $\mu(x)$ распределения вещества в зависимости от значения преобразования Фурье потенциала взаимодействия в точке p_0 . В фазе А: $\tilde{\varphi}(p_0) > 0$, в фазе В: $\tilde{\varphi}(p_0) = 0$ и в фазе С: $\tilde{\varphi}(p_0) < 0$ (рисунок 3).

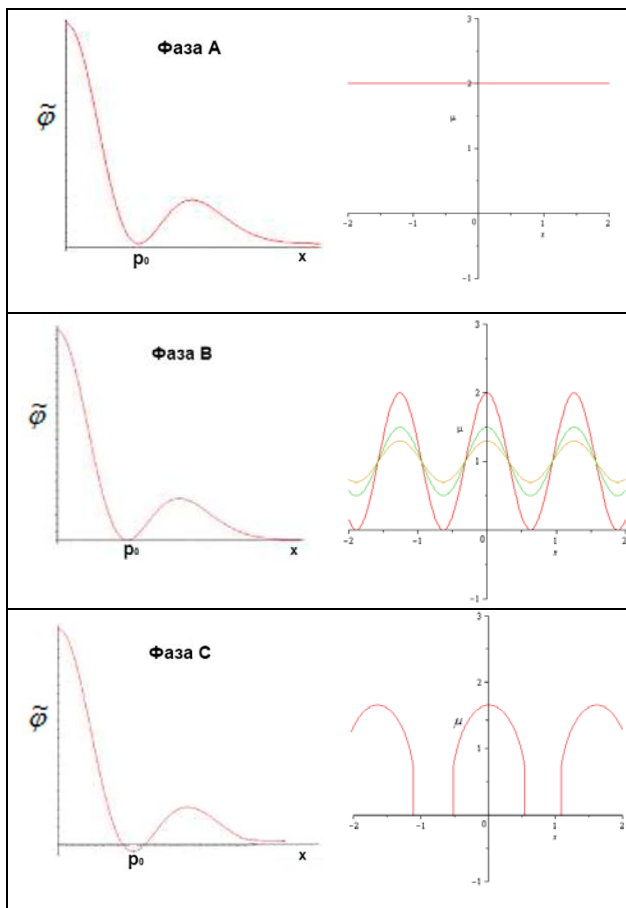


Рис. 3 – Виды преобразования Фурье потенциала (слева) и соответствующие им виды распределения плотности вещества (справа)

Из графика в фазе С, видно, что вещество имеет разрывную плотность (появляются резкие границы), что также характерно для фазового перехода.

Таким образом, можно сделать вывод, что при незначительных изменениях потенциала взаимодействия элементов среды (вследствие изменения некоторых параметров), повлекших изменение знака значения $\tilde{\varphi}(p_0)$, происходит резкая перестройка конфигурации вещества.

Алгоритм, описывающий численное решение уравнения равновесия (4) описан в работе [7]. Используя (25), (28) и (29), а также учитывая необходимое значение потенциала взаимодействия в точке локального минимума $\tilde{\varphi}(p_0) < 0$, было применено решение для задачи:

$$H(0, x) = 1 - 0.1e^{-0.25x^2}, \quad -\infty < x < \infty$$

в случае, когда функция, описывающая взаимодействие элементов одномерной сплошной среды имеет вид (рисунок 4):

$$\varphi(x) = \frac{(|x| - 0.8)^2 - 0.21}{1 + x^4}$$

Вычисляя значения для формирования значений необходимых параметров, использовалась среда разработки программного обеспечения Microsoft Visual Studio 2017, а сам алгоритм описан с помощью языка программирования C++. Для графической визуализации решения, были использованы программные приложения Maple.

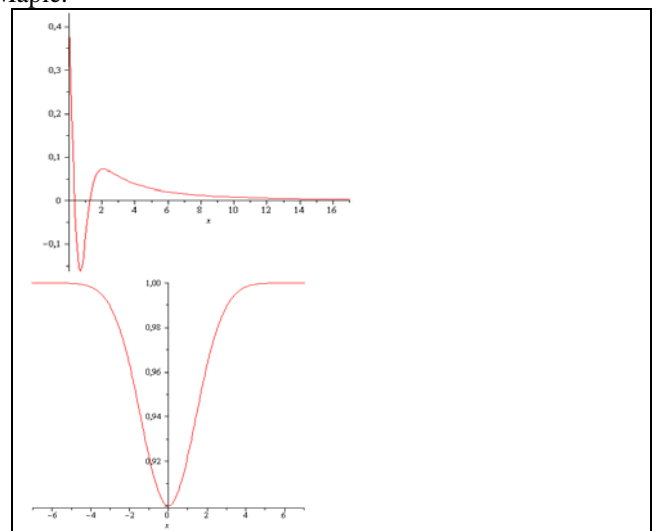


Рис. 4 – График функций $\varphi(x)$ и $H(0, x)$

Результат преобразования функции $H(t, x)$ в зависимости от $\varphi(x)$ представлен на рисунках 5, 6.

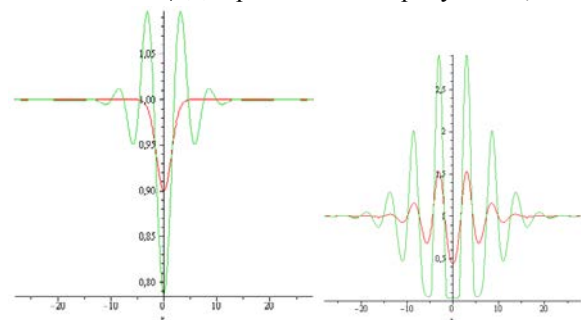


Рис. 5 – Функция $H(t, x)$ при $t=0,120$ и $t=220,320$

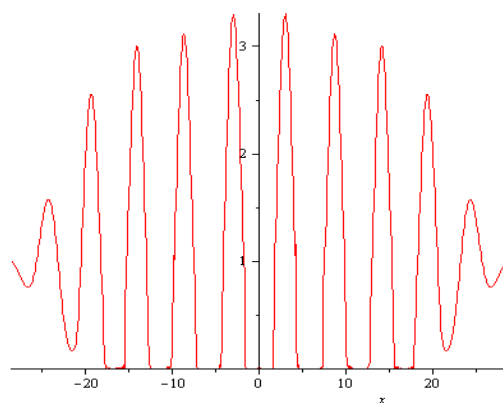


Рис. 6 – Функция $H(t, x)$ при $t=500$

Заметим, что поскольку при описании динамики непрерывной одномерной сплошной среды с помощью уравнения (4) функция $H(t, x)$ имеет смысл плотности среды. Представленные на рисунках 5, 6 изменения плотности среды со временем соответствуют процессу кристаллизации среды из начальной неоднородности, имеющей смысл центра кристаллизации.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Метод асимптотической динамики используемый для поиска равновесного состояния сплошной среды, использован для решения задачи на поиск устойчивого состояния в зависимости от преобразования Фурье описывающего потенциал взаимодействия $\varphi(r)$.

Скорость и точность расчетов зависят от выбранной методологии расчет группы задач динамики распределения разреженного газа, а также от технических средств и алгоритмов формирующих выходные данные на этапе расчета алгоритма численными методами с помощью программ или математических пакетов.

БИБЛИОГРАФИЯ

- [1] Bodnar, M. An integro-differential equation arising as a limit of individual cell-based models / M. Bodnar, J.J.L. Velazquez // *Journal of Differential Equations*. 2006. – V. 222. – p. 341–380.
- [2] Choksiy R. On minimizers of interaction functionals with competing attractive and repulsive potentials / R Choksiy, R. Fetecauz, I. Topaloglu // *McGill University*. 2014. – p. 31.
- [3] Ilyushin, A.A. Momentnye teorii v mekhanike tverdyh deformiruemyyh tel / A.A. Ilyushin, V.A. Lomakin // *Prochnost' i plastichnost'*. 1971. – p. 54–61.
- [4] Kunin, I.A. Teoriya uprugih sred s mikrostrukturaj / I.A. Kunin // *Nauka*. 1975. – p. 416.
- [5] Leverentz, A. An Integrodifferential Equation Modeling 1-D Swarming Behavior / A. Leverentz // *Harvey Mudd College*. 2008. – p. 60.
- [6] Pal'mov, V.A. Osnovnye uravneniya teorii nesimmetrichnoj uprugosti / V.A. Pal'mov // *Priklad. matematika i mekhanika*. 1964. – V. 3. – p. 401–408.
- [7] Sadkov A.A. Metod setok v zadache kristallizacii / A.A. Sadkov, Y.S. Polovinkina / *Matematicheskoe modelirovanie processov i sistem*. 2016. – p. 69-74.
- [8] Sedov L.I. Modeli sploshnyh sred s vnutrennimi stepenyami svobody / L.I. Sedov // *Priklad. matematika i mekhanika*. 1968. – V. 5. – p. 771–785.
- [9] Tomashevsky I.L. Equilibrium configurations of the continuous medium with nonlocal interaction / I.L. Tomashevsky // *Arctic Environmental Research*. 2014. – V. 3. – p.123-129.

Search for a stable state of a continuous medium with a non-local interaction depending on the interaction potential using the method of asymptotic dynamics

Anatoliy A. Sadkov, Vasilii N. Popov

Annotation — The problems of modeling spatial configurations of a continuous medium in several stable states, the interaction between spatially distant elements of which is characterized by a potential energy proportional to the masses of the elements and the interaction potential, which depends only on the distance between the elements, are considered.

The study of the equation of equilibrium of a continuous medium makes it possible to form an algorithm of a mathematical model for the formation of detailed data on the density of a continuous medium in various phase states. Depending on the value of the Fourier $\tilde{\varphi}(p_0)$ transform of the interaction potential at the minimum point, and also in accordance with the properties of a one-dimensional continuous medium, the density of the medium assumes the corresponding phase state. The basis for choosing numerical methods for solving the problem according to a given algorithm significantly affects the accuracy of searching for detailed data. The «bottlenecks» in this algorithm are the calculation of integral values, where a particular method of searching for values in the grid nodes is selected to form the final result value or set of values.

The calculation of detailed data according to the formulated algorithm was carried out in the Microsoft Visual Studio 2017 software development environment, and the algorithm itself is described using the C++ programming language. For graphical visualization of the solution, Maple software applications were used. To accurately calculate the final detailed data with an accuracy of up to five decimal places, the Simpson method was used to find the value of the integral.

Key words — continuous medium, steady state medium, Fourier transform.

REFERENCES

- [1] Bodnar, M. An integro-differential equation arising as a limit of individual cell-based models / M. Bodnar, J.J.L. Velazquez // Journal of Differential Equations. 2006. – V. 222. – p. 341–380.
- [2] Choksiy R. On minimizers of interaction functionals with competing attractive and repulsive potentials / R Choksiy, R. Fetecauz, I. Topaloglu // McGill University. 2014. – p. 31.
- [3] Ilyushin, A.A. Momentnye teorii v mekhanike tverdyh deformiruemyyh tel / A.A. Il'yushin, V.A. Lomakin // Prochnost' i plastichnost'. 1971. – p. 54–61.
- [4] Kunin, I.A. Teoriya uprugih sred s mikrostrukturoj / I.A. Kunin // Nauka. 1975. – p. 416.
- [5] Leverentz, A. An Integrodifferential Equation Modeling 1-D Swarming Behavior / A. Leverentz // Harvey Mudd College. 2008. – p. 60.
- [6] Pal'mov, V.A. Osnovnye uravneniya teorii nesimmetrichnoj uprugosti / V.A. Pal'mov // Priklad. matematika i mekhanika. 1964. – V. 3. – p. 401–408.
- [7] Sadkov A.A. Metod setok v zadache kristallizacii / A.A. Sadkov, Y.S. Polovinkina / Matematicheskoe modelirovanie processov i sistem. 2016. – p. 69-74.
- [8] Sedov L.I. Modeli sploshnyh sred s vnutrennimi stepenyami svobody / L.I. Sedov // Priklad. matematika i mekhanika. 1968. – V. 5. – p. 771–785.
- [9] Tomashevsky I.L. Equilibrium configurations of the continuous medium with nonlocal interaction / I.L. Tomashevsky // Arctic Environmental Research. 2014. – V. 3. – p.123-129.