



**ВЕСТНИК РОССИЙСКОГО УНИВЕРСИТЕТА
ДРУЖБЫ НАРОДОВ**

СЕРИЯ:

**МАТЕМАТИКА. ИНФОРМАТИКА.
ФИЗИКА**

Том 26 № 3 (2018)

**Научный журнал
Издается с 1993 г.**

Издание зарегистрировано Федеральной службой по надзору в сфере связи, информационных технологий и массовых коммуникаций (Роскомнадзор)

Свидетельство о регистрации ПИ № ФС 77-61205 от 30.03.2015 г.

Учредитель: Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Российский университет дружбы народов»

**RUDN JOURNAL OF
MATHEMATICS,
INFORMATION SCIENCES
AND PHYSICS**

Volume 26 Number 3 (2018)

Founded in 1993

Founder: RUDN University

DOI: 10.22363/2312-9735-2018-26-3

ISSN 2312-9743 (online); 2312-9735 (print)

4 выпуска в год

Входит в перечень рецензируемых научных изданий ВАК РФ.

Включен в каталог периодических изданий Ульрих (Ulrich's Periodicals Directory: <http://www.ulrichsweb.com>).

Языки: русский, английский.

Материалы журнала размещаются на платформе РИНЦ Российской научной электронной библиотеки, Electronic Journals Library Cyberleninka.

Цель и тематика

Журнал «Вестник Российского университета дружбы народов» существует с 1993 г., а серия «Математика. Информатика. Физика» была создана в 2006 г. путем объединения серий «Физика», «Математика», «Прикладная математика и информатика», «Прикладная и компьютерная математика».

В журнале обсуждаются современные проблемы физики, математики, теории массового обслуживания, теории телетрафика, информатики, компьютерных наук, проектирования и разработки программного обеспечения, баз данных.

Журнал входит в список периодических изданий, публикации в которых принимаются к рассмотрению ВАК РФ при защите докторских диссертаций.

На журнал можно подписаться в любом почтовом отделении (каталог агентства «Роспечать») или в издательстве.

Выпуски журнала в реферативно-библиографическом и полнотекстовом виде доступны в базе данных Российского индекса научного цитирования (РИНЦ) на платформе Научной электронной библиотеки (НЭБ) elibrary.ru.

Правила оформления статей, архив и дополнительная информация размещены на сайте: <http://journals.rudn.ru/miph>.

Электронный адрес: miphj@rudn.university, vestnik-miph@sci.pfu.edu.ru.

ISSN 2312-9743 (online); 2312-9735 (print)

4 issues per year.

Languages: Russian, English.

Indexed in Ulrich's Periodicals Directory: <http://www.ulrichsweb.com>.

Aim and Scope

RUDN Journal of Mathematics, Information Sciences and Physics was created in 2006 by combining the series "Physics", "Mathematics", "Applied Mathematics and Computer Science", "Applied Mathematics and Computer Mathematics".

Discussed issues affecting modern problems of physics, mathematics, queuing theory, the Teletraffic theory, computer science, software and databases development.

Journal has a high qualitative and quantitative indicators. The Editorial Board consists of well-known scientists of world renown, whose works are highly valued and are cited in the scientific community. Articles are indexed in the Russian and foreign databases. Each paper is reviewed by at least two reviewers, the composition of which includes PhDs, are well known in their circles. Author's part of the magazine includes both young scientists, graduate students and talented students, who publish their works, and famous giants of world science.

The Journal is published in accordance with the policies of COPE (Committee on Publication Ethics).

The editors are open to thematic issue initiatives with guest editors.

Further information regarding notes for contributors, subscription, and back volumes is available at <http://journals.rudn.ru/miph>.

E-mail: miphj@rudn.university, vestnik-miph@sci.pfu.edu.ru.

© Российский университет дружбы народов, 2018

© Peoples' Friendship University of Russia, 2018

РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ

Главный редактор

Рыбаков Юрий Петрович —
Заслуженный деятель науки РФ,
доктор физико-математических наук,
профессор, профессор института
физических исследований и технологий,
РУДН, Россия,
rybakov_yur@rudn.university

Заместитель главного редактора

Севастьянов Леонид Антонович —
доктор физико-математических наук,
профессор, профессор кафедры
прикладной информатики и теории
вероятностей, РУДН, Россия,
sevastianov_la@rudn.university

Члены редколлегии

Гайдамака Юлия Васильевна (Москва, Россия) — доктор физико-математических наук, доцент кафедры прикладной информатики и теории вероятностей РУДН

Ильгисонис Виктор Игоревич (Москва, Россия) — доктор физико-математических наук, профессор, директор института физических исследований и технологий РУДН, директор направления научно-технических исследований и разработок Госкорпорации «Росатом»

Самуйлов Константин Евгеньевич (Москва, Россия) — доктор технических наук, профессор, заведующий кафедрой прикладной информатики и теории вероятностей РУДН

Гнатич Михал (Словакия) — DrSc., профессор, профессор университета им. П.И. Шафарика, г. Кошице

Датта Гупта Субхашис (Индия) — PhD, профессор Хайдерабадского университета

Мартикайнен Олли Эрки (Финляндия) — PhD., научный сотрудник Научно-исследовательского института экономики Финляндии

Медведев Михаил Викторович (США) — доктор физико-математических наук, профессор Канзасского университета

Рамирез Инестрозо Рафаэль Орландо (Испания) — PhD, профессор университета Ровира и Вирхилий, Таррагона, Каталония, Испания

Саха Биджан (Бангладеш) — доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник лаборатории информационных технологий Объединённого института ядерных исследований, г. Дубна

Чулуунбаатар Очбадрах (Монголия) — доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник Института математики Монгольского Государственного Университета, начальник сектора лаборатории информационных технологий Объединённого института ядерных исследований, г. Дубна

Литературный редактор: *К. В. Зенкин*

Компьютерная вёрстка: *А. В. Королькова*

Адрес редакции:

115419, Москва, Россия, ул. Орджоникидзе, д. 3

тел. +7(495)955-07-16, e-mail: ipk@rudn.university

Адрес редакционной коллегии

серии «Математика. Информатика. Физика»:

ул. Орджоникидзе, 3, комн. 313, г. Москва, Россия, 115419

тел. +7(495) 952-02-50, e-mail: mipjh@rudn.university, vestnik-miph@sci.pfu.edu.ru

сайт: <http://journals.rudn.ru/miph>

Подписано в печать 30.07.2018. Выход в свет 08.08.2018. Формат 70×100/16.

Бумага офсетная. Печать офсетная. Гарнитура «Computer Modern».

Усл. печ. л. 11,68 Тираж 500 экз. Заказ № 814. Цена свободная

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования

«Российский университет дружбы народов» (РУДН)

117198, г. Москва, Россия, ул. Миклухо-Маклая, д. 6

Отпечатано в типографии ИПК РУДН

115419, Москва, Россия, ул. Орджоникидзе, д. 3,

тел. (495) 952-04-41, e-mail: ipk@rudn.university

EDITORIAL BOARD

Editor-in-Chief

Rybakov Yu. P. — Doctor of Physical and Mathematical Sciences, professor, Honored Scientist of Russia, professor of the Institute of Physical Research & Technologies, Peoples' Friendship University of Russia (RUDN University), Russian Federation, rybakov_yup@rudn.university

Vice Editor-in-Chief

Sevastianov L. A. — Doctor of Physical and Mathematical Sciences, professor, professor of the Department of Applied Probability and Informatics, Peoples' Friendship University of Russia (RUDN University), Russian Federation, sevastianov_la@rudn.university

Members of the editorial board

Gaidamaka Yu. V. (Moscow, Russian Federation) — Doctor of Physical and Mathematical Sciences, associate professor of the Department of Applied Probability and Informatics of Peoples' Friendship University of Russia (RUDN University)

Il'gisonis V. I. (Moscow, Russian Federation) — Doctor of Physical and Mathematical Sciences, professor, Head of the Institute of Physical Research & Technologies of Peoples' Friendship University of Russia (RUDN University), Head of the direction of scientific and technical research and development of the State Atomic Energy Corporation ROSATOM

Samouylov K. E. (Moscow, Russian Federation) — Doctor of Engineering Sciences, professor, Head of Department of Applied Probability and Informatics of Peoples' Friendship University of Russia (RUDN University)

Hnatich Mikhal (Slovakia) – DrSc., professor of Pavol Jozef Safarik University in Kosice

Datta Gupta Subhashish (India) — PhD in Physics and Mathematics, professor of Hyderabad University

Martikainen Olli Erkki (Finland) — PhD in Engineering, member of the Research Institute of the Finnish Economy (ETLA, Helsinki)

Medvedev M. V. (USA) — Doctor of Physical and Mathematical Sciences, professor of the Kansas University

Ramirez Inostrozo Raphael Orlando (Spain) — PhD professor of Rovira i Virgili University (Universitat Rovira i Virgili), Spain

Saha Bijan (Bangladesh) — Doctor of Physical and Mathematical Sciences, leading researcher in Laboratory of Information Technologies of the Joint Institute for Nuclear Research (Dubna, Russian Federation)

Chuluunbaatar Ochbadrah (Mongolia) — Doctor of Physical and Mathematical Sciences, leading researcher in the Institute of Mathematics, State University of Mongolia, Head of the Department in Laboratory of Information Technologies of the Joint Institute for Nuclear Research (Dubna, Russian Federation)

Review Editor: *K. V. Zenkin*

Computer Design: *A. V. Korolkova*

Address of editorial board:

Peoples' Friendship University of Russia

Ordzhonikidze str., 3, Moscow, Russia, 115419

Tel. +7 (495) 955-07-16, e-mail: ipk@rudn.university

Address of editorial board

“RUDN Journal of Mathematics, Information Sciences and Physics”:

Ordzhonikidze str., 3, Moscow, Russia, 115419

Tel. +7 (495) 952-02-50, miphj@rudn.university, vestnik-miph@sci.pfu.edu.ru

site: <http://journals.rudn.ru/miph>

Printing run 500 copies. Open price.

Federal State Autonomous Educational Institution of Higher Education “RUDN University”

6 Miklukho-Maklaya str., 117198 Moscow, Russia

Printed at RUDN Publishing House:

3 Ordzhonikidze str., 115419 Moscow, Russia,

Ph. +7 (495) 952-04-41; e-mail: ipk@rudn.university



СОДЕРЖАНИЕ

Математическое моделирование

- Блинков Ю. А., Евдокимова Е. В., Могилевич Л. И., Ребрина А. Ю.** Моделирование волновых процессов в двух соосных оболочках, заполненных вязкой жидкостью и окружённых упругой средой 203
- Дугар-Жабон В. Д., Каряка В. И., Терлецкий А. Я.** Увеличение производительности ЭЦР источника отрицательных водородных ионов с помощью дополнительных эмиттеров низкотемпературных электронов 216
- Гусев А. А.** Метод конечных элементов высокого порядка точности для решения двумерных эллиптических краевых задач двух и трёх тождественных атомов на прямой 226
- Кулябов Д. С., Ловецкий К. П., ЛеАньНьат** Простейшая модель нелинейных спиновых волн в графеновых структурах 244
- Ловецкий К. П., Николаев Н. Э., Севастьянов А. Л.** Определение оптических свойств материала тонких плёнок на основе измерений интенсивности света 252

Информатика и вычислительная техника

- Семенова О. В., Власкина А. С., Медведева Е. Г., Зарипова Э. Р., Гудкова И. А.** Процедура установления соединения по радиоканалу случайного доступа с возможностью ретрансляции 261
- Велиева Т. Р.** Параметрическое исследование системы с модулем активного управления трафиком 272

Компьютерные и информационные науки

- Малых М. Д., ЮйИн** Методика отыскания алгебраических интегралов дифференциальных уравнений первого порядка 285
- Правила оформления статей** 292



CONTENTS

Mathematical Modeling

- Blinkov Y. A., Evdokimova E. V., Mogilevich L. I., Rebrina A. Y.** Wave Processes Modeling in Two Coaxial Shells Filled with a Viscous Liquid and Surrounded by Elastic Medium 203
- Dugar-Jabon V. D., Karyaka V. I., Terletsky A. Ya.** The Increase of Negative Hydrogen Ions Production in ECR Source by use of the Additional Low-Temperature Emitters of Electrons 216
- Gusev A. A.** Finite Element Method of High-Order Accuracy for Solving Two Dimensional Elliptic Boundary-Value Problems of Two and Three Identical Atoms in a Line 226
- Kulyabov D. S., Lovetskiy K. P., Le Anh Nhat** Simple Model of Nonlinear Spin Waves in Graphene Structures 244
- Lovetskiy K. P., Nikolaev N. E., Sevastianov A. L.** Optical Characterization of a Thin-Film Material Based on Light Intensity Measurements 252

Computer Science and Computer Engineering

- Semenova O. V., Vlaskina A. S., Medvedeva E. G., Zaripova E. R., Gudkova I. A.** RACH Session Initiation Procedure with Retranslations 261
- Velieva T. R.** Parametric Study of the System with Active Queue Management Module 272

Computer and Information Sciences

- Malykh M. D., Yu Ying** The Method of Finding Algebraic Integral for First-order Differential Equations 285
- Guidelines for Authors** 292



Математическое моделирование

УДК 532.516:539.3

DOI: 10.22363/2312-9735-2018-26-3-203-215

Моделирование волновых процессов в двух соосных оболочках, заполненных вязкой жидкостью и окружённых упругой средой

Ю. А. Блинков*, Е. В. Евдокимова[†], Л. И. Могилевич[†], А. Ю. Ребрина[†]

* Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского

ул. Астраханская, д. 83, г. Саратов, Россия, 410012

[†] Саратовский государственный технический университет имени Гагарина Ю. А.

ул. Политехническая, д. 77, г. Саратов, Россия, 410054

На базе связанных задач гидроупругости, описываемых уравнениями динамики оболочек и вязкой несжимаемой жидкости, известны математические модели волновых движений в бесконечно длинных геометрически нелинейных оболочках, содержащих вязкую несжимаемую жидкость, в виде обобщённых уравнений Кортвега–де Вриза (КдВ). Математические модели волнового процесса в бесконечно длинных геометрически нелинейных соосных цилиндрических упругих оболочках с вязкой несжимаемой жидкостью между оболочками, полученные применением метода возмущений по малому параметру задачи, описываются в виде системы обобщённых уравнений КдВ. В представленной статье проведено исследование модели волновых явлений в двух геометрически нелинейных упругих соосных цилиндрических оболочках, содержащих вязкую несжимаемую жидкость как между ними, так и внутри, и окружённых упругой средой, действующей как в нормальном, так и в продольном направлении. Для рассмотренных систем уравнений с учётом влияния жидкости с помощью построения базиса Грёбнера получены разностные схемы типа Кранка–Николсона. Для генерации этих разностных схем использованы базовые интегральные разностные соотношения, которые аппроксимируют исходную систему уравнений.

Ключевые слова: нелинейные волны, вязкая несжимаемая жидкость, цилиндрические упругие оболочки, базис Грёбнера

Введение

Взаимодействие упругих элементов конструкций с жидкостью рассматривалось в разных аспектах. В условиях вибрации взаимодействие вязкой несжимаемой жидкости с упругими оболочками исследовалось в [1–3], а с учётом вращения жидкости — в [4].

В современной волновой динамике одним из важных направлений является изучение поведения волн деформаций в упругих тонкостенных конструкциях. Проблема распространения волн в газовой динамике и теории упругих оболочек изучается при помощи линеаризованных уравнений. При этом скорость распространения возмущений считается постоянной и равной скорости распространения звука в невозмущённой среде. Однако ряд явлений, несмотря на малые значения зависимых переменных, целиком определяется зависимостью скорости распространения возмущений от величины зависимых переменных и исследуется на базе нелинейных уравнений. Эти исследования проводятся с помощью методов возмущений, таких как метод сравнимых асимптотических разложений, метод деформируемых координат, метод многомасштабных разложений.

Кроме того, проблемы распространения волн в упругих и вязкоупругих тонкостенных конструкциях, в том числе в бесконечно длинных цилиндрических оболочках

без взаимодействия с вязкой несжимаемой жидкостью, рассматривались в [5, 6] с позиции теории солитонов.

Известны математические модели, учитывающие влияние вязкой несжимаемой жидкости на волновые процессы в бесконечно длинных геометрически и физически нелинейных оболочках [7, 8]. При этом найдены эффекты влияния вязкой несжимаемой жидкости на поведение волны деформации в оболочке в зависимости от коэффициента Пуассона материала оболочки. В частности, при наличии жидкости в оболочке из неорганических материалов (различные трубопроводы в технологических сооружениях) выявлен экспоненциальный рост амплитуды волны. В случае органического материала (кровеносные сосуды) волна в жидкости быстро затухает.

Решение поставленной в работе задачи для геометрически нелинейных оболочек представляется актуальным и сложным, имеет важное значение для акустической диагностики и неразрушающего контроля материалов. Во многом интерес к подобным задачам инициирован необходимостью анализа упругих и динамических свойств нанообъектов, в частности, карбоновых нанотрубок.

В настоящей работе развивается метод возмущений для моделирования нелинейных волн деформаций в упругой цилиндрической оболочке, заполненной вязкой несжимаемой жидкостью, окружённой упругой средой и при конструкционном демпфировании в продольном направлении. Аналогичная задача без влияния упругой среды была рассмотрена в работе [9]. Показано влияние вязкой несжимаемой жидкости, заполняющей оболочку, окружающей упругой среды и конструкционного демпфирования на поведение продольных волн деформации в упругой цилиндрической оболочке.

Постановка задачи

Рассмотрим окружённые упругой средой две соосные бесконечно длинные упругие оболочки (см. рис. 1), между которыми находится вязкая несжимаемая жидкость. Зазор между оболочками, занимаемый жидкостью δ , радиус срединной поверхности оболочки R ; $R_1 = R^{(1)} - h_0^{(1)}/2$ — внутренний радиус внешней оболочки; $R_2 = R^{(2)} + h_0^{(2)}/2$ — внешний радиус внутренней оболочки; $R_3 = R^{(2)} - h_0^{(2)}/2$ — внутренний радиус внутренней оболочки, $R^{(1)}$, $R^{(2)}$ — радиусы срединных поверхностей внешней и внутренней оболочек; $h_0^{(1)}$, $h_0^{(2)}$ — их толщины. В дальнейшем, для внешней оболочки будем использовать обозначение сверху индексом $(i) = (1)$, а для внутренней — индексом $(i) = (2)$.

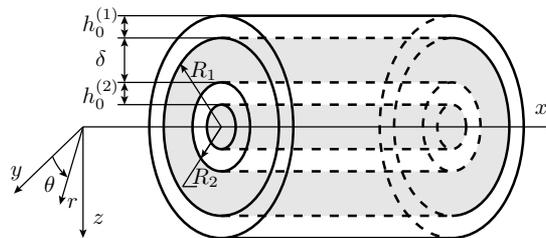


Рис. 1. Бесконечно длинные соосные цилиндрические оболочки

Записывая уравнения движения элемента цилиндрической оболочки в перемещениях для модели Кирхгофа–Лява, рассмотрим материал с линейной зависимостью интенсивности напряжений σ_i от интенсивности деформаций e_i [10]: $\sigma_i = E e_i$, где E — модуль Юнга.

Уравнения движения вязкой несжимаемой жидкости и уравнение неразрывности в цилиндрической системе координат r , Θ , x записываются, в случае осесимметричного течения, в виде [11, 12]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial V_r}{\partial t} + V_r \frac{\partial V_r}{\partial r} + V_x \frac{\partial V_r}{\partial x} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial r} &= \nu \left[\frac{\partial^2 V_r}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial V_r}{\partial r} + \frac{\partial^2 V_r}{\partial x^2} - \frac{V_r}{r^2} \right], \\ \frac{\partial V_x}{\partial t} + V_r \frac{\partial V_x}{\partial r} + V_x \frac{\partial V_x}{\partial x} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} &= \nu \left[\frac{\partial^2 V_x}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial V_x}{\partial r} + \frac{\partial^2 V_x}{\partial x^2} \right], \\ \frac{\partial V_r}{\partial r} + \frac{V_r}{r} + \frac{\partial V_x}{\partial x} &= 0. \end{aligned} \quad (1)$$

На границе оболочек и жидкости на рис. (1) при $r = R_i - W^{(i)}$ выполняются условия прилипания жидкости [12]

$$\frac{\partial U^{(i)}}{\partial t} = V_x + U^{(i)} \frac{\partial V_x}{\partial x} - W^{(i)} \frac{\partial V_x}{\partial r}, \quad -\frac{\partial W^{(i)}}{\partial t} = V_r + U^{(i)} \frac{\partial V_r}{\partial x} - W^{(i)} \frac{\partial V_r}{\partial r}. \quad (2)$$

Здесь t — время; x, r — цилиндрические координаты; V_x, V_r — проекции на оси цилиндрической системы координат вектора скорости жидкости; p — давление, ρ — плотность, ν — кинематический коэффициент вязкости жидкости; $U^{(i)}$ — продольное упругое перемещение оболочки по оси x ; $W^{(i)}$ — прогиб оболочки, положительный к центру кривизны.

Уравнения динамики оболочки записываются в виде [13, 14]

$$\begin{aligned} \rho_0 h_0^{(i)} c_0^2 \left[U_x^{(i)} + \frac{1}{2} U_x^{(i)2} + \frac{1}{2} W_x^{(i)2} + \frac{h_0^{(i)2}}{24} W_{xx}^{(i)2} - \mu_0 \frac{W^{(i)}}{R^{(i)}} \right]_x - \rho_0 h_0^{(i)} U_{tt}^{(i)} - \\ - \left[k_3 R^{(i)2} \frac{\rho_0 h_0^{(i)} c_0^2}{l^4} U^{(i)} - k_4 \frac{\rho_0 h_0^{(i)} c_0^2}{l^2 R^{(i)2}} U^{(i)3} \right] (2-i) = -q_x^{(i)} - \tilde{q}_x (i-1), \\ \rho_0 h_0^{(i)} c_0^2 \left\langle \frac{h_0^{(i)2}}{12} W_{xxxx}^{(i)} - \right. \\ \left. - \left\{ W_x^{(i)} \left(U_x^{(i)} + \frac{1}{2} U_x^{(i)2} + \frac{1}{2} W_x^{(i)2} + \frac{h_0^{(i)2}}{24} W_{xx}^{(i)2} - \mu_0 \frac{W^{(i)}}{R^{(i)}} \right) \right\}_x - \right. \\ \left. - \frac{1}{R} \left(\mu_0 U_x^{(i)} + \frac{1}{2} \mu_0 U_x^{(i)2} + \frac{1}{2} \mu_0 W_x^{(i)2} + \frac{h_0^{(i)2}}{24} \mu_0 W_{xx}^{(i)2} - \frac{W^{(i)}}{R} \right) \right\rangle + \\ + k_1 \frac{\rho_0 h_0^{(i)} c_0^2}{l^2} W^{(i)} (2-i) + \rho_0 h_0^{(i)} W_{tt}^{(i)} = (-1)^{i-1} q_n + \tilde{q}_n (i-1). \end{aligned} \quad (3)$$

Здесь $h_0^{(i)}$ — толщины оболочек; μ_0 — коэффициент Пуассона, ρ_0 — плотность; $U^{(i)}, W^{(i)}$ — продольное перемещение и прогиб, положительный к центру кривизны, x — продольная координата; t — время; q_x^i, q_n — напряжения со стороны жидкости, находящейся между оболочками; \tilde{q}_x, \tilde{q}_n — напряжения со стороны жидкости, заполняющей внутреннюю оболочку; реакция упругой среды в нормальном и продольном направлениях [5, 6, 15–18]:

$$k_1 \frac{\rho_0 h_0^{(1)} c_0^2}{l^2} W^{(1)}, \quad k_3 \frac{R^{(1)2} \rho_0 h_0^{(1)} c_0^2}{l^4} U^{(1)} - k_4 \frac{\rho_0 h_0^{(1)} c_0^2}{l^2 R^{(1)2}} U^{(1)3};$$

$c_0 = \sqrt{E/(\rho_0(1-\mu_0^2))}$ – скорость распространения продольных волн в оболочке.
Напряжения со стороны слоя жидкости определяются формулами

$$q_n = -p + 2\rho\nu\frac{\partial V_r}{\partial r}, \quad q_x = \rho\nu\left(\frac{\partial V_x}{\partial r} + \frac{\partial V_r}{\partial x}\right). \quad (4)$$

Уравнения динамики оболочек

Принимая за характерную длину l – длину волны, перейдём к безразмерным переменным для исследования уравнений (3):

$$W^{(i)} = w_m u_3^{(i)}, \quad U^{(i)} = u_m u_1^{(i)}, \quad t^* = \frac{c_0}{l}t, \quad x^* = \frac{x}{l}. \quad (5)$$

Здесь w_m, u_m – характерные значения прогиба W и продольного перемещения U . Полагаем

$$\frac{u_m}{l} = \varepsilon = o(1), \quad \frac{R^{(i)}}{l} = O(\varepsilon^{\frac{1}{2}}), \quad \frac{h_0^{(i)}}{R^{(i)}} = O(\varepsilon), \quad \frac{w_m}{R} = O(\varepsilon). \quad (6)$$

Применим метод асимптотических разложений, вводя независимые переменные в виде

$$\xi = x^* - ct^*, \quad \tau = \varepsilon t^*, \quad (7)$$

где c – безразмерная неизвестная скорость волны, τ – быстрое время, а ε – малый параметр.

Записываем систему уравнений (3) в безразмерных переменных с использованием формул (5)–(7) и разложим упругие перемещения по степеням $\varepsilon = \frac{u_m}{l}$:

$$u_1^{(i)} = u_{10}^{(i)} + \varepsilon u_{11}^{(i)} + \dots, \quad u_3^{(i)} = u_{30}^{(i)} + \varepsilon u_{31}^{(i)} + \dots \quad (8)$$

Подставим разложение (8) в полученные уравнения из (3) и после некоторых преобразований этих уравнений, аналогичных приведённым в [8, 19], приравняем нулю коэффициенты при ε^0 , получим

$$\frac{w_m l}{u_m R^{(i)}} u_{30}^{(i)} u_{xi} = \mu_0 u_{10\xi}^{(i)}, \quad (1 - \mu_0^2 - c^2) u_{10\xi\xi}^{(i)} = 0, \quad (9)$$

откуда определяется безразмерная скорость волны $c^2 = 1 - \mu_0^2$.

Из следующего приближения по ε , учитывая (9), находится уравнение, являющееся составным для u_{10} :

$$\begin{aligned} u_{10\xi\tau}^{(i)} + \frac{u_m}{l\varepsilon} \frac{\sqrt{1-\mu_0^2}}{2} u_{10\xi}^{(i)} u_{10\xi\xi}^{(i)} + \frac{1}{\varepsilon} \left(\frac{R^{(i)}}{l}\right)^2 \frac{\mu_0^2 \sqrt{1-\mu_0^2}}{2} u_{10\xi\xi\xi}^{(i)} + \\ + \frac{2-i}{2\sqrt{1-\mu_0^2}} \left(\mu_0^2 k_1 \frac{R^{(i)^2}}{l^2 \varepsilon} u_{10\xi\xi} - k_3 \frac{R^{(i)^2}}{l^2 \varepsilon} u_{10} + k_4 \frac{u_m^2}{R^{(i)^2} \varepsilon} u_{10}^3 \right) = \\ = -\frac{1}{2\sqrt{1-\mu_0^2}} \frac{l^2}{\varepsilon u_m \rho_0 h_0^2 c_0^2} \left(q_x^{(i)} - \mu_0 \frac{R^{(i)}}{l} (-1)^{i-1} \frac{\partial q_n}{\partial \xi} \right). \quad (10) \end{aligned}$$

В представлениях (8) взято два первых члена разложения по ε для учёта нелинейности исходной системы уравнений (3), как следует из системы (10).

В случае отсутствия жидкости правая часть уравнений (10) обращается в ноль и система распадается на независимые уравнения, каждое из которых имеет своё точное решение. Для определения напряжений, действующих со стороны жидкости, можно воспользоваться результатами работы [9]:

$$\frac{1}{\rho_0 h_0^{(i)} c_0^2} \frac{\partial q_n}{\partial \xi} = \frac{\rho \nu}{\delta^3 \rho_0 h_0^{(i)} c_0} 12 \sqrt{1 - \mu_0^2} \left[u_m R^{(2)} u_{10\xi}^{(2)} - u_m R^{(1)} u_{10\xi}^{(1)} \right],$$

$$q_x^{(i)} = \frac{\delta}{2l} \frac{\partial q_n}{\partial \xi} (-1)^i, \quad (11)$$

$$\tilde{q}_x - \mu_0 \frac{R^{(2)}}{l} \frac{\partial \tilde{q}_n}{\partial \xi} = -\frac{\tilde{\nu}}{R_3 c_0} \tilde{\rho} c_0^2 4 \sqrt{1 - \mu_0^2} \frac{u_m}{l} \left[1 - \left(2\mu_0 \frac{R^{(2)}}{R_3} \right)^2 \right] \frac{\partial u_{10}^{(2)}}{\partial \xi}.$$

Подставляя (11) в систему уравнение (10), окончательно получим

$$\begin{aligned} & u_{10\xi\tau}^{(1)} + \frac{u_m}{l\varepsilon} \frac{\sqrt{1 - \mu_0^2}}{2} u_{10\xi}^{(1)} u_{10\xi\xi}^{(1)} + \frac{1}{\varepsilon} \left(\frac{R}{l} \right)^2 \frac{\mu_0^2 \sqrt{1 - \mu_0^2}}{2} u_{10\xi\xi\xi}^{(1)} + \\ & + \frac{1}{2\sqrt{1 - \mu_0^2}} \left[k_1 \mu_0^2 \frac{R^{(1)2}}{l^2 \varepsilon} u_{10\xi\xi}^{(1)} - k_3 \frac{R^{(2)2}}{l^2 \varepsilon} u_{10}^{(1)} + k_4 \frac{n_m^2}{R^{(1)2} \varepsilon} u_{10}^{(1)3} \right] + \\ & + 6\mu_0^2 \frac{\rho l}{\rho_0 h_0} \frac{v}{R c_0 \varepsilon} \left(\frac{R}{\delta} \right)^3 \left[1 + \frac{\delta}{2\mu_0 R} \right] \left[u_{10\xi}^{(1)} - u_{10\xi}^{(2)} \right] = 0 \\ & u_{10\xi\tau}^{(2)} + \frac{u_m}{l\varepsilon} \frac{\sqrt{1 - \mu_0^2}}{2} u_{10\xi}^{(2)} u_{10\xi\xi}^{(2)} + \frac{1}{\varepsilon} \left(\frac{R}{l} \right)^2 \frac{\mu_0^2 \sqrt{1 - \mu_0^2}}{2} u_{10\xi\xi\xi}^{(2)} + \\ & + 6\mu_0^2 \frac{\rho l}{\rho_0 h_0} \frac{v}{R c_0 \varepsilon} \left(\frac{R}{\delta} \right)^3 \left[1 + \frac{\delta}{2\mu_0 R} \right] \left[u_{10\xi}^{(2)} - u_{10\xi}^{(1)} \right] - 2(1 - 4\mu_0^2) \frac{\tilde{\rho} l}{\rho_0 h_0} \frac{\tilde{\nu}}{R c_0 \varepsilon} u_{10\xi}^{(2)} = 0. \end{aligned} \quad (12)$$

Здесь с принятой точностью $h_0/R \approx O(\varepsilon)$, $\delta/R_2 = \psi \ll 1$, обозначено $R^{(1)} \approx R^{(2)} = R$, при этом положено $h_0^{(1)} \approx h_0^{(2)} \approx h_0$.

Легко видеть, что замена $u_{10\xi}^{(1)} = c_3 \phi^{(1)}$, $u_{10\xi}^{(2)} = \eta = c_1 \xi$, $t = c_2 \tau$, где

$$\begin{aligned} c_2 &= 6\mu_0^2 \frac{\rho l}{\rho_0 h_0 \varepsilon} \left(\frac{R}{\delta} \right)^2 \left[1 + \frac{\delta}{2\mu_0 R} \right] \frac{v}{\delta c_0}, \quad c_1 = \left[c_2 \varepsilon \left(\frac{l}{R} \right)^2 \frac{2}{\mu_0^2 \sqrt{1 - \mu_0^2}} \right]^{\frac{1}{3}}, \\ c_3 &= \frac{c_2 l \varepsilon^2}{c_1 u_m \sqrt{1 - \mu_0^2}}, \quad \sigma_1 = \frac{c_1}{c_2} \frac{k_1}{2\sqrt{1 - \mu_0^2}} \mu_0^2 \frac{R^2}{l^2 \varepsilon}, \quad \sigma_3 = \frac{1}{c_1 c_2} \frac{k_2}{2\sqrt{1 - \mu_0^2}} \frac{R^2}{l^2 \varepsilon}, \\ \sigma_4 &= \frac{c_3^2}{c_2 c_1^3} \frac{k_4}{2\sqrt{1 - \mu_0^2}} \frac{u_m}{R^2 \varepsilon}, \quad \sigma = \frac{1 - 4\mu_0^2}{3\mu_0^2} \left(\frac{\delta}{R} \right)^3 \frac{\tilde{\rho} \tilde{\nu}}{\rho \nu} \left[1 + \frac{\delta}{2\mu_0 R} \right]^{-1}, \end{aligned} \quad (13)$$

позволяет записать систему уравнений (12) в виде

$$\phi_t^{(1)} + 6\phi^{(1)} \phi_\eta^{(1)} + \phi_{\eta\eta\eta}^{(1)} + \sigma_1 \phi_\eta^{(1)} - \sigma_3 \int \phi^{(1)} d\eta + \sigma_4 \left(\int \phi^{(1)} d\eta \right)^3 + \phi^{(1)} - \phi^{(2)} = 0, \quad (14)$$

$$\phi_t^{(2)} + 6\phi^{(2)} \phi_\eta^{(2)} + \phi_{\eta\eta\eta}^{(2)} + \phi^{(2)} - \phi^{(1)} - \sigma \phi^{(2)} = 0. \quad (15)$$

Система уравнений (14)–(15) при отсутствии жидкости распадается на два независимых уравнения. Для $\phi^{(1)}$:

$$\phi_t^{(1)} + 6\phi^{(1)}\phi_\eta^{(1)} + \phi_{\eta\eta\eta}^{(1)} + \sigma_1\phi_\eta^{(1)} - \sigma_3 \int \phi^{(1)} d\eta + \sigma_4 \left(\int \phi^{(1)} d\eta \right)^3 = 0$$

с точным решением

$$\phi^{(1)} = \frac{\sigma_3}{2\sigma_4} \cosh^{-2} \left\{ \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\sigma_3}{\sigma_4}} \left[\eta - \left(\frac{\sigma_3}{\sigma_4} + 2\sigma_4 + \sigma_1 \right) t \right] \right\}. \quad (16)$$

Для $\phi^{(2)}$: $\phi_t^{(2)} + 6\phi^{(2)}\phi_\eta^{(2)} + \phi_{\eta\eta\eta}^{(2)} = 0$ с точным решением

$$\phi^{(2)} = \frac{\sigma_3}{2\sigma_4} \cosh^{-2} \left\{ \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\sigma_3}{\sigma_4}} \left[\eta - \frac{\sigma_3}{\sigma_4} t \right] \right\}, \quad (17)$$

где σ_3/σ_4 — произвольная величина.

Как следует из (16) и (17), скорость солитона $\phi^{(1)}$ больше, чем скорость солитона $\phi^{(2)}$ при одинаковых амплитудах. При наличии жидкости во внутренней оболочке и окружающей упругой среды для внешней оболочки численное исследование системы уравнений (14)–(15) при начальном условии

$$\phi^{(1)}(\eta, 0) = \phi^{(2)}(\eta, 0) = \frac{\sigma_3}{2\sigma_4} \cosh^{-2} \left\{ \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\sigma_3}{\sigma_4}} \eta \right\} \quad (18)$$

позволит оценить их влияние на волновые процессы в соосных оболочках.

Численное моделирование

В статьях [20] подробно рассмотрен процесс дискретизации квазилинейных дифференциальных уравнений эволюционного типа на примере классического уравнения КдВ, численные методы решения которого рассмотрены в [21]. Полученная с помощью данного подхода дискретизация уравнения КдВ имеет точность второго порядка как по пространственному шагу h сетки, так и по временному τ . Поскольку разностная схема неявная, т.е. устойчива при достаточно малом h , то её согласованность и устойчивость приводят к её сходимости [22]. Также строго доказана классическая теорема эквивалентности Лакса для начальной задачи с одним линейным дифференциальным уравнением и обобщениями на нелинейный случай [23].

Существует большое количество методов построения разностных схем для дифференциальных уравнений. Мы будем использовать алгоритм построения конечно-разностной аппроксимации согласно [24].

Запишем систему уравнений (14)–(15) в виде интегралов по контуру

$$\oint_{\partial\Omega} \left(-\phi_{\eta\eta}^{(1)} - 3\phi^{(1)2} - \sigma_1\phi^{(1)} \right) dt + \phi^{(1)} d\eta + \iint_{\Omega} (-\sigma_3\Psi + \sigma_4\Psi^3) dt d\eta + \iint_{\Omega} (\phi^{(1)} - \phi^{(2)}) dt d\eta = 0, \quad (19)$$

$$\oint_{\partial\Omega} \left(-\phi_{\eta\eta}^{(2)} - 3\phi^{(2)2} \right) dt + \phi^{(2)} d\eta + \iint_{\Omega} (\phi^{(2)} - \phi^{(1)} - \sigma\phi^{(2)}) dt d\eta = 0 \quad (20)$$

для $\int \phi^{(1)} d\eta = \Psi$, любой области Ω и любого интервала $a > b$. На разностной сетке сопоставим $u_j^{(i)n} = \phi^{(i)}(t_n, \eta_j)$, $U_j^n = \Psi(t_n, \eta_j)$ и выберем в качестве базового контур, показанный на рис. 2.

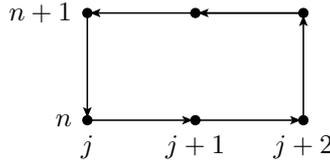


Рис. 2. Базовой контур для уравнений (19)–(20)

Добавим интегральные соотношения

$$\int_{\eta_j}^{\eta_{j+1}} u^{(i)}_{\eta} d\eta = u^{(i)}(t, \eta_{j+1}) - u^{(i)}(t, \eta_j),$$

$$\int_{\eta_j}^{\eta_{j+2}} u^{(i)}_{\eta\eta} d\eta = u^{(i)}_{\eta}(t, \eta_{j+2}) - u^{(i)}_{\eta}(t, \eta_j), \quad \int_{\eta_j}^{\eta_{j+2}} u d\eta = U(t, \eta_{j+2}) - U(t, \eta_j). \tag{21}$$

Применяя для численного интегрирования формулы Ньютона–Котеса и полагая $t_{n+1} - t_n = \tau$, $\eta_{j+1} - \eta_j = h$, перепишем соотношения (19), (20), (21) в виде

$$\begin{aligned} & \left(- \left(u_{\eta\eta}^{(1)n} + u_{\eta\eta}^{(1)n+1} - u_{\eta\eta}^{(1)n} - u_{\eta\eta}^{(1)n+1} \right) - \right. \\ & \left. - 3 \left(u_j^{(1)2n} + u_j^{(1)2n+1} - u_{j+2}^{(1)2n} - u_{j+2}^{(1)2n+1} \right) \right) \cdot \frac{\tau}{2} + \left(u_{j+1}^{(1)n+1} - u_{j+1}^{(1)n} \right) \cdot 2h + \\ & + \left(\left(u_{j+1}^{(1)n+1} + u_{j+1}^{(1)n} \right) - \left(u_{j+1}^{(2)n+1} + u_{j+1}^{(2)n} \right) - \right. \\ & \left. - \sigma_3 \left(U_{j+1}^{n+1} + U_{j+1}^n \right) + \sigma_4 \left(U_{j+1}^{3n+1} + U_{j+1}^{3n} \right) \right) \cdot h\tau = 0, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \left(- \left(u_{\eta\eta}^{(2)n} + u_{\eta\eta}^{(2)n+1} - u_{\eta\eta}^{(2)n} - u_{\eta\eta}^{(2)n+1} \right) - \right. \\ & \left. - 3 \left(u_j^{(2)2n} + u_j^{(2)2n+1} - u_{j+2}^{(2)2n} - u_{j+2}^{(2)2n+1} \right) \right) \cdot \frac{\tau}{2} + \left(u_{j+1}^{(2)n+1} - u_{j+1}^{(2)n} \right) \cdot 2h + \\ & + \left(\left(u_{j+1}^{(2)n+1} + u_{j+1}^{(2)n} \right) - \left(u_{j+1}^{(1)n+1} + u_{j+1}^{(1)n} \right) - \sigma \left(u_{j+1}^{(2)n+1} + u_{j+1}^{(2)n} \right) \right) \cdot h\tau = 0, \end{aligned}$$

$$\left(u_{\eta}^{(i)n} + u_{\eta}^{(i)n} \right) \cdot \frac{h}{2} = u_{j+1}^{(i)n} - u_j^{(i)n},$$

$$u_{\eta\eta}^{(i)n} \cdot 2h = u_{\eta}^{(i)n} - u_{\eta}^{(i)n},$$

$$\left(u_{j+2}^{(1)n} + 4u_{j+1}^{(1)n} + u_j^{(1)n} \right) \frac{h}{3} = U_{\eta_{j+2}}^n - U_{\eta_j}^n.$$

Поскольку исходное дифференциальное уравнение (14)–(15) нелинейно, то за счёт выбора допустимого упорядочения в данном случае в базисе Грёбнера [25] лидирующие мономы не будут состоять из нелинейных членов.

В результате получим разностную схему для уравнения (14)–(15)

$$\begin{aligned} & \frac{u^{(1)j}_{n+1} - u^{(1)j}_n}{\tau} + 3 \frac{(u^{(1)j}_{2n+1} - u^{(1)j}_{2n}) + (u^{(1)j}_{2n} - u^{(1)j}_{2n-1})}{4h} + \\ & + \frac{(u^{(1)j}_{j+2} - 2u^{(1)j}_{j+1} + 2u^{(1)j}_{j-1} - u^{(1)j}_{j-2})}{4h^3} + \\ & + \frac{(u^{(1)j}_{j+2} - 2u^{(1)j}_{j+1} + 2u^{(1)j}_{j-1} - u^{(1)j}_{j-2})}{4h^3} + \\ & + \sigma_1 \frac{(u^{(1)j}_{j+1} - u^{(1)j}_{j-1}) + (u^{(1)j}_{j+1} - u^{(1)j}_{j-1})}{4h} - \sigma_3 \frac{U_j^{n+1} + U_j^n}{2} + \\ & + \sigma_4 \frac{U_j^{3n+1} + U_j^{3n}}{2} + \frac{u^{(1)j}_{n+1} + u^{(1)j}_n}{2} - \frac{u^{(2)j}_{n+1} + u^{(2)j}_n}{2} = 0, \quad (22) \end{aligned}$$

$$\left(u^{(1)j}_{j+1} + 4u^{(1)j}_j + u^{(1)j}_{j-1} \right) \frac{h}{3} - (U_{j+1} - U_{j-1}) = 0, \quad (23)$$

$$\begin{aligned} & \frac{u^{(2)j}_{n+1} - u^{(2)j}_n}{\tau} + 3 \frac{(u^{(2)j}_{2n+1} - u^{(2)j}_{2n}) + (u^{(2)j}_{2n} - u^{(2)j}_{2n-1})}{4h} + \\ & + \frac{(u^{(2)j}_{j+2} - 2u^{(2)j}_{j+1} + 2u^{(2)j}_{j-1} - u^{(2)j}_{j-2})}{4h^3} + \\ & + \frac{(u^{(2)j}_{j+2} - 2u^{(2)j}_{j+1} + 2u^{(2)j}_{j-1} - u^{(2)j}_{j-2})}{4h^3} - \\ & + \frac{u^{(2)j}_{n+1} + u^{(2)j}_n}{2} - \frac{u^{(1)j}_{n+1} + u^{(1)j}_n}{2} - \sigma \frac{u^{(2)j}_{n+1} + u^{(2)j}_n}{2} = 0. \quad (24) \end{aligned}$$

Разностная схема (22), (24) подобна схеме Кранка–Николсона для уравнения теплопроводности.

Реализация разностной схемы (22)–(24) была проведена с использованием программного обеспечения с открытым кодом SciPy и SymPy, построенном для языка программирования Python3.

Полученные неявные разностные схемы нелинейны относительно следующего временного слоя, поэтому для построения решения использована следующая линеаризация

$$v_{k+1}^2 = v_{k+1}^2 - v_k^2 + v_k^2 = (v_{k+1} - v_k)(v_{k+1} + v_k) + v_k^2 \approx v_{k+1} \cdot 2v_k - v_k^2.$$

На границах вычислительной области использовались условия равенства первых производных $\phi_\eta^{(1)} = \phi_\eta^{(2)} = 0$. Поскольку схема (22)–(24) имеет 5-точечный шаблон по оси η , то на границах использовались по два соотношения, например для левой границы:

$$\frac{df(x_i)}{dx} \approx h^2 \frac{d^3 f}{dx^3} + \frac{-5f(x_i) + 9f(x_{i+2}) - 4f(x_{i+3})}{6h},$$

$$\frac{df(x_i)}{dx} \approx \frac{11h^2}{6} \frac{d^3f}{dx^3} + \frac{-5f(x_{i+1}) + 8f(x_{i+2}) - 3f(x_{i+3})}{2h}.$$

На рис. 3 и 4 видно влияние окружающей упругой среды на поведение нелинейной волны деформации в системе в зависимости от коэффициента Пуассона μ_0 в (13) в выражении для σ .

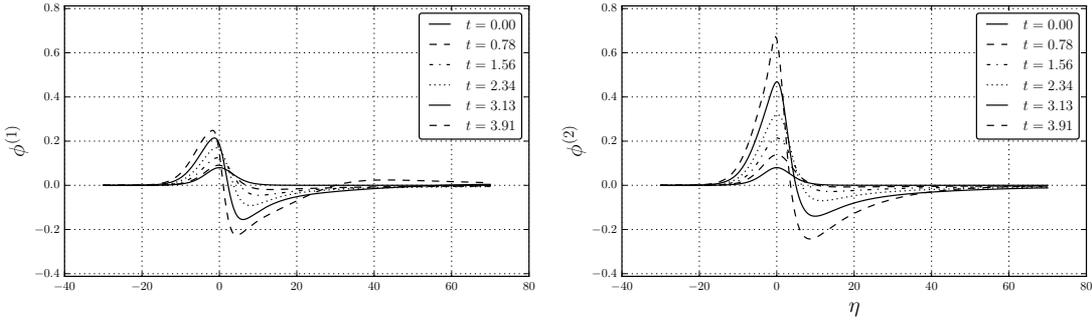


Рис. 3. Графики численного решения уравнений (14)–(15) при $\sigma_1 = 1$ с начальным условием (18) с $\sigma_3 = 0,004$, $\sigma_4 = 0,1$ и $\sqrt{\sigma_3/\sigma_4} = 0,2$

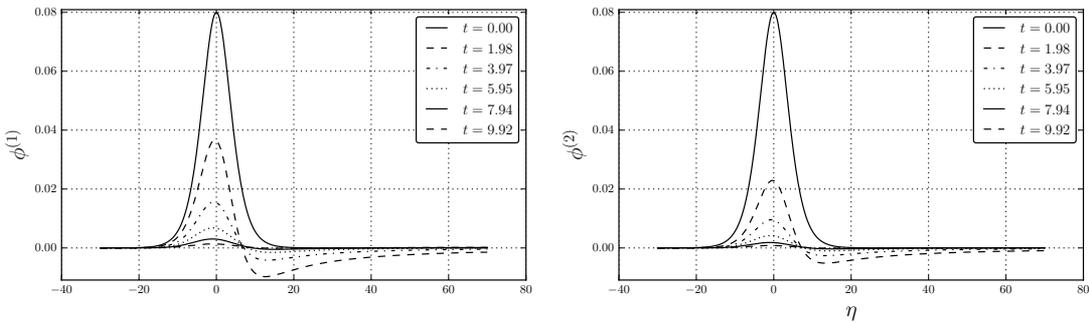


Рис. 4. Графики численного решения уравнений (14)–(15) при $\sigma_1 = -1$ с начальным условием (18) с $\sigma_3 = 0,004$, $\sigma_4 = 0,1$ и $\sqrt{\sigma_3/\sigma_4} = 0,2$

В случае $\mu_0 < 1/2$ (рисунок 3) наблюдается волнообразование и рост амплитуды волны относительно времени в обеих оболочках при более слабом во внешней оболочке в следствии влияния окружающей упругой среды. И наоборот, при $\mu_0 > 1/2$ (рис. 4) наблюдается волнообразование и падение амплитуды волны относительно времени в обеих оболочках при более сильном во внешней оболочке.

Заключение

Выполненные вычислительные эксперименты позволили впервые оценить влияние окружающей упругой среды для внешней оболочки на поведение нелинейной волны деформации в системе, когда внутренняя оболочка заполнена вязкой несжимаемой жидкостью.

В результате под влиянием воздействия упругой среды на внешнюю оболочку и наличия жидкости во внутренней оболочке наблюдается в зависимости от коэффициента Пуассона меньший рост или падение амплитуды волны во внешней оболочке по сравнению с внутренней.

Литература

1. *Paidoussis M. P., Nguyen V. B., Misra A. K.* A Theoretical Study of the Stability of Cantilevered Coaxial Cylindrical Shells Conveying Fluid // *Journal of Fluids and Structures*. — 1991. — Т. 5, № 2. — С. 127–164. — DOI: 10.1016/0889-9746(91)90454-W.
2. *Amabili M.* Nonlinear Vibrations and Stability of Shells and Plates. — Cambridge University Press, 2008. — С. 374. — DOI: 10.1017/S09780511619694.
3. *Могилевич Л. И., Попов В. С.* Динамика взаимодействия упругого цилиндра со слоем вязкой несжимаемой жидкости // *Известия Российской академии наук. Механика твердого тела*. — 2004. — № 5. — С. 179–190.
4. *Бочкарёв С. А., Матвеевко В. П.* Устойчивость коаксиальных цилиндрических оболочек, содержащих вращающийся поток жидкости // *Вычислительная механика сплошных сред*. — 2013. — Т. 6, № 1. — С. 94–102. — DOI: 10.7242/1999-6691/2013.6.1.12.
5. *Багдоев А. Г., Ерофеев В. И., Шешенин С. Ф.* Линейные и нелинейные волны в диспергирующих сплошных средах. — М.: Физматлит, 2009. — С. 318.
6. *Ерофеев В. И., Кажжаев В. В., Павлов И. С.* Неупругое взаимодействие и расщепление солитонов деформации, распространяющихся в зернистой среде // *Вычислительная механика сплошных сред*. — 2013. — Т. 6, № 2. — С. 140–150. — DOI: 10.7242/1999-6691/2013.6.2.17.
7. *Блинков Ю. А., Иванов С. В., Могилевич Л. И.* Математическое и компьютерное моделирование нелинейных волн деформаций в оболочке, содержащей вязкую жидкость // *Вестник РУДН. Серия: Математика. Информатика. Физика*. — 2012. — Т. 3. — С. 52–60.
8. *Блинков Ю. А., Ковалева И. А., Могилевич Л. И.* Моделирование динамики нелинейных волн в соосных геометрически и физически нелинейных оболочках, содержащих вязкую несжимаемую жидкость между ними // *Вестник РУДН. Серия: Математика. Информатика. Физика*. — 2013. — Т. 3. — С. 42–51.
9. *Блинков Ю. А., Мезянжин А. В., Могилевич Л. И.* Распространение нелинейных волн в соосных физически нелинейных цилиндрических оболочках, заполненных вязкой жидкостью // *Вестник РУДН. Серия: Математика, информатика, физика*. — 2017. — Т. 25, № 1. — С. 19–35. — DOI: 10.22363/2312-9735-2017-25-1-19-35.
10. *Каудерер Г.* Нелинейная механика. — М.: Иностранная литература, 1961. — С. 778.
11. *Лойцянский Л. Г.* Механика жидкости и газа. — М.: Дрофа, 2003. — С. 840.
12. *Валландер С. В.* Лекции по гидроаэромеханике. — Л.: Изд. ЛГУ, 1978. — С. 296.
13. *Вольмир А. С.* Нелинейная динамика пластинок и оболочек. — М.: Наука, 1972. — С. 432.
14. *Вольмир А. С.* Оболочки в потоке жидкости и газа: задачи гидроупругости. — М.: Наука, 1979. — С. 320.
15. *Власов В. З., Леонтьев Н. Н.* Балки, плиты и оболочки на упругом основании. — М.: Гос. изд. физ.-мат. литературы, 1960. — С. 490.
16. Несинусоидальные изгибные волны в балке Тимошенко, лежащей на нелинейно упругом основании / В. И. Ерофеев, В. В. Кажжаев, Е. Е. Лисенкова, Н. П. Семерикова // *Проблемы машиностроения и надежности машин*. — 2008. — № 3. — С. 30–36.
17. *Михасев Г. И., Шейко А. Н.* О влиянии параметра упругой нелокальности на собственные частоты колебаний углеродной нанотрубки в упругой среде. — 2012. — Т. 153. — С. 41–44.

18. Бочкарев А. В., Землянухин А. И., Могилевич Л. И. Уединенные волны в неоднородной цилиндрической оболочке, взаимодействующей с упругой средой // *Акустический журнал*. — 2017. — Т. 63, № 2. — С. 145–151.
19. Математическое и компьютерное моделирование динамики нелинейных волн в физически нелинейных упругих цилиндрических оболочках, содержащих вязкую несжимаемую жидкость / А. Ю. Блинкова, С. В. Иванов, А. Д. Ковалев, Л. И. Могилевич // *Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика*. — 2012. — Т. 12, № 2. — С. 12–18. — DOI: 10.18500/1816-9791-2016-16-2-184-197.
20. Блинков Ю. А., Гердт В. П., Маринов К. Б. Дискретизация квазилинейных эволюционных уравнений методами компьютерной алгебры // *Программирование*. — 2017. — № 2. — С. 28–34.
21. Belashov V. Y., Vladimirov S. V. *Solitary Waves in Dispersive Complex Media: Theory, Simulation, Applications*. — Berlin: Springer-Verlag, 2005. — С. 292.
22. Самарский А. А. *Теория разностных схем*. — 3-е издание. — М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1989. — С. 786.
23. Rosinger E. E. *Nonlinear Equivalence, Reduction of PDEs to ODEs and Fast Convergent Numerical Methods*. — London: Pitman, 1983. — С. 439. — DOI: 10.1137/1026088.
24. Gerdt V. P., Blinkov Y. A., Mozhilkin V. V. *Gröbner Bases and Generation of Difference Schemes for Partial Differential Equations // Symmetry, Integrability and Geometry: Methods and Applications*. — 2006. — Т. 2. — С. 26. — DOI: 10.3842/SIGMA.2006.051.
25. Gerdt V. P. *Consistency Analysis of Finite Difference Approximations to PDE Systems*. — MMCP. Lecture Notes in Computer Science, 2011. — Т. 7125. — С. 28–42.

UDC 532.516:539.3

DOI: 10.22363/2312-9735-2018-26-3-203-215

Wave Processes Modeling in Two Coaxial Shells Filled with a Viscous Liquid and Surrounded by Elastic Medium

Y. A. Blinkov*, E. V. Evdokimova†, L. I. Mogilevich†, A. Y. Rebrina†

* *Saratov State University*

83, Astrahanskaya str., Saratov, 410012, Russian Federation

† *Yuri Gagarin State Technical University of Saratov*

77, Politekhnikeskaya str., Saratov, 410054, Russian Federation

The investigation of deformation waves behavior in elastic shells is one of the important trends in the contemporary wave dynamics. There exist mathematical models of wave motions in infinitely long geometrically non-linear shells, containing viscous incompressible liquid based on the related hydroelasticity problems, which are derived by the shells dynamics and viscous incompressible liquid equations in the form of centralized Korteweg–de Vries (KdV) equations. In addition, mathematical models or the wave process in infinitely long geometrically non-linear coaxial cylindrical elastic shells are obtained by the perturbation method. These models differ from the known ones by the consideration of incompressible liquid between the shells, based on the related hydroelasticity problems. These problems are described by shell dynamics and viscous incompressible liquid equations with corresponding edge conditions in the form of generalized KdV equations system. The paper presents the investigation of wave occurrences in two geometrically non-linear elastic coaxial cylindrical shells of Kirchhoff–Love type, containing viscous incompressible liquid both in between and inside, and surrounded by an elastic medium, acting in both normal and longitudinal directions. The difference schemes of Crank–Nicholson type are obtained for the considered equations system by taking into account liquid impact and with the help of Gröbner basis construction. To generate these difference schemes, the basic integral difference correlations, approximating initial equations system, were used.

Key words and phrases: nonlinear waves, viscous incompressible liquid, elastic cylindrical shells, Gröbner basis

References

1. M. P. Paidoussis, V. B. Nguyen, A. K. Misra, A Theoretical Study of the Stability of Cantilevered Coaxial Cylindrical Shells Conveying Fluid, *Journal of Fluids and Structures* 5 (2) (1991) 127–164. doi:10.1016/0889-9746(91)90454-W.
2. M. Amabili, *Nonlinear Vibrations and Stability of Shells and Plates*, Cambridge University Press, 2008. doi:10.1017/CBO9780511619694.
3. L. I. Mogilevich, V. S. Popov, Dynamics of the Interaction of an Elastic Cylinder with a Layer of a Viscous Incompressible Fluid, *Mechanics of Solids* (5) (2004) 179–190, in Russian.
4. S. A. Bochkarev, V. P. Matveenko, Stability of Coaxial Cylindrical Shells Containing a Rotating Fluid Flow, *Computational Continuum Mechanics* 6 (1) (2013) 94–102, in Russian. doi:10.7242/1999-6691/2013.6.1.12.
5. A. G. Bagdoev, V. I. Erofeev, S. F. Sheshenin, *Linear and Nonlinear Waves in Dispersive Continuous Media*, Fizmatlit, Moscow, 2009, in Russian.
6. V. I. Erofeev, V. V. Kazhaev, I. S. Pavlov, Inelastic Interaction and Splitting of Strain Solitons Propagating in a Granular Medium, *Computational Continuum Mechanics* 6 (2) (2013) 140–150, in Russian. doi:10.7242/1999-6691/2013.6.2.17.
7. Y. A. Blinkov, S. V. Ivanov, L. I. Mogilevich, Mathematical and Computer Modeling of Non-linear Deformation Waves in Shell with Viscous Liquid Inside, *Bulletin of Peoples' Friendship University of Russia. Series: Mathematics. Information Sciences. Physics* 3 (2012) 52–60, in Russian.
8. Y. A. Blinkov, I. A. Kovaleva, L. I. Mogilevich, Nonlinear Waves Dynamics Modeling in Coaxial Geometrically And Physically Nonlinear Shell Containing Viscous Incompressible Fluid in between, *Bulletin of Peoples' Friendship University of Russia. Series: Mathematics. Information Sciences. Physics* 3 (2013) 42–51, in Russian.
9. Y. A. Blinkov, A. V. Mesyazhin, L. I. Mogilevich, Propagation of Nonlinear Waves in Coaxial Physically Nonlinear Cylindrical Shells Filled with a Viscous Fluid, *RUDN Journal of Mathematics, Information Sciences and Physics* 25 (1) (2017) 19–35, in Russian. doi:10.22363/2312-9735-2017-25-1-19-35.
10. G. Cowderer, *Nonlinear Mechanics, Foreign Literature*, Moscow, 1961, in Russian.
11. L. G. Loytsiansky, *Mechanics of Liquid and Gas*, Drofa, Moscow, 2003, in Russian.
12. S. V. Vallander, *Lectures on Hydroaeromechanics*, Ed. Leningrad State University, Leningrad, 1978, in Russian.
13. A. S. Volmir, *Nonlinear Dynamics of Plates and Shells*, Nauka, Moscow, 1972, in Russian.
14. A. S. Volmir, *Shells in a Fluid and Gas Flow: Hydroelasticity Problems*, Nauka, Moscow, 1979, in Russian.
15. V. Z. Vlasov, N. N. Leontiev, *Beams, Plates and Shells on an Elastic Base*, Gos. ed. fiz.-mat. literature, Moscow, 1960, in Russian.
16. V. I. Erofeev, V. V. Kazhaev, E. E. Lisenkova, N. P. Semerikova, Nonsinusoidal Bending Waves in Timoshenko Beam Lying on Nonlinear Elastic Foundation, *Journal of Machinery Manufacture and Reliability* 36 (3) (2008) 230–235, in Russian.
17. G. Mikhasev, A. Sheiko, On the Influence of the Elastic Nonlocality Parameter on the Natural Frequencies of Vibrations of a Carbon Nanotube in an Elastic Medium, Vol. 153, *BSTU, Minsk*, 2012, pp. 41–44, in Russian.
18. A. V. Bochkarev, A. I. Zemlyanukhin, L. I. Mogilevich, Solitary Waves in an Inhomogeneous Cylindrical Shell Interacting with an Elastic Medium, *Akusticheskij Zhurnal* 63 (2) (2017) 145–151, in Russian.
19. A. Y. Blinkova, S. V. Ivanov, A. D. Kovalev, L. I. Mogilevich, Mathematical and Computer Modeling of Nonlinear Waves Dynamics in a Physically Nonlinear Elastic Cylindrical Shells with Viscous Incompressible Liquid inside Them, *Izvestiya of Saratov University. New series. Series: Physics* 12 (2) (2012) 12–18, in Russian. doi:10.18500/1816-9791-2016-16-2-184-197.

20. Y. A. Blinkov, V. P. Gerdt, K. B. Marinov, Discretization of Quasilinear Evolution Equations by Computer Algebra Methods, Programming and Computer Software 43 (2) (2017) 84–89. doi:10.1134/S0361768817020049.
21. V. Y. Belashov, S. V. Vladimirov, Solitary Waves in Dispersive Complex Media: Theory, Simulation, Applications, Springer-Verlag, Berlin, 2005.
22. A. A. Samarskii, The Theory of Difference Schemes, Marcel Dekker Inc., N.-Y., 2001.
23. E. E. Rosinger, Nonlinear Equivalence, Reduction of PDEs to ODEs and Fast Convergent Numerical Methods, Pitman, London, 1983. doi:10.1137/1026088.
24. V. P. Gerdt, Y. A. Blinkov, V. V. Mozzhilkin, Gröbner Bases and Generation of Difference Schemes for Partial Differential Equations, Symmetry, Integrability and Geometry: Methods and Applications 2 (2006) 26. doi:10.3842/SIGMA.2006.051.
25. V. P. Gerdt, Consistency Analysis of Finite Difference Approximations to PDE Systems, Vol. 7125, MMCP. Lecture Notes in Computer Science, 2011, pp. 28–42.

© Блинков Ю. А., Евдокимова Е. В., Могилевич Л. И., Ребрина А. Ю., 2018

Для цитирования:

Блинков Ю. А., Евдокимова Е. В., Могилевич Л. И., Ребрина А. Ю. Моделирование волновых процессов в двух соосных оболочках, заполненных вязкой жидкостью и окружённых упругой средой // Вестник Российского университета дружбы народов. Серия: Математика. Информатика. Физика. — 2018. — Т. 26, № 3. — С. 203–215. — DOI: 10.22363/2312-9735-2018-26-3-203-215.

For citation:

Blinkov Y. A., Evdokimova E. V., Mogilevich L. I., Rebrina A. Y. Wave Processes Modeling in Two Coaxial Shells Filled with a Viscous Liquid and Surrounded by Elastic Medium, RUDN Journal of Mathematics, Information Sciences and Physics 26 (3) (2018) 203–215. DOI: 10.22363/2312-9735-2018-26-3-203-215. In Russian.

Сведения об авторах:

Блинков Юрий Анатольевич — д.ф.-м.н., заведующий кафедры математического и компьютерного моделирования Саратовского национального исследовательского государственного университета им. Н.Г. Чернышевского (e-mail: blinkovua@info.sgu.ru)

Евдокимова Екатерина Владимировна — аспирант кафедры прикладной математики и системного анализа Саратовского государственного технического университета им. Гагарина Ю. А. (e-mail: eev2106@mail.ru)

Могилевич Лев Ильич — д.т.н., профессор кафедры прикладной математики и системного анализа Саратовского государственного технического университета им. Гагарина Ю. А. (e-mail: mogilevich@sgu.ru)

Ребрина Анастасия Юрьевна — доцент, к.ф.-м.н., доцент кафедры прикладной математики и системного анализа Саратовского государственного технического университета им. Гагарина Ю. А. (e-mail: anblinkova26@gmail.com)

Information about the authors:

Blinkov Yu. A. — Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Chair of Department of Mathematic and Computer Modeling, Saratov State University (e-mail: blinkovua@info.sgu.ru)

Evdokimova E. V. — Postgraduate of Department of Applied Mathematics and System Analysis, Saratov State Technical University (e-mail: eev2106@mail.ru)

Mogilevich L. I. — Doctor of Engineering, Professor of Department of Applied Mathematics and System Analysis, Saratov State Technical University (e-mail: mogilevich@sgu.ru)

Rebrina A. Yu. — Candidate of Physics and Mathematics, Associate Professor of Department of Applied Mathematics and System Analysis, Saratov State Technical University (e-mail: anblinkova26@gmail.com)



УДК 537.5

DOI: 10.22363/2312-9735-2018-26-3-216-225

Увеличение производительности ЭЦР источника отрицательных водородных ионов с помощью дополнительных эмиттеров низкотемпературных электронов

В. Д. Дугар-Жабон*, В. И. Каряка†, А. Я. Терлецкий†

* *Индустриальный университет Сантандера
АА 678 Букараманга, Колумбия*

† *Институт физических исследований и технологий
Российский университет дружбы народов
ул. Миклухо-Маклая, д. 6, Москва, Россия, 117198*

Анализ механизмов образования отрицательных водородных ионов в источнике плазмы, работающем на электронном циклотронном резонансе, позволяет сделать вывод о принципиально важной роли, которую играют в этом процессе низкотемпературные электроны. В источниках такого типа получение отрицательных ионов происходит следующим образом. Вначале молекулы водорода, сталкиваясь в плазме с энергичными электронами, переходят на высоковозбуждённые электронные и колебательные уровни. Далее, присоединяя электроны низких энергий, возбуждённые молекулы приобретают отрицательный заряд. Отрицательные атомарные ионы получают в результате диссоциации возбуждённых отрицательно заряженных молекул водорода. Необходимые для этого процесса электроны низких энергий получают в результате столкновений быстрых электронов плазмы с плазменными электродами. В представленных экспериментах для дополнительного увеличения числа электронов низких энергий использовалась термоэлектронная эмиссия из вольфрамовых нагревателей и керамических LaV₆ электродов, размещённых в камере источника. В экспериментах установлено, что термоэлектронная эмиссия электронов из вольфрамовых нагревателей улучшала стабильность разряда и расширяла диапазон давлений, при которых существовал разряд, существенно не изменяя величину тока отрицательных ионов. Эмиссия же электронов из LaV₆ электродов увеличивала ток отрицательных ионов из источника более чем в 3 раза.

Ключевые слова: источник отрицательных ионов, электронный циклотронный резонанс, электронная эмиссия, диссоциация, колебательное возбуждение молекул, электронное возбуждение

1. Введение

Интерес к источникам отрицательных водородных ионов вызван их широким использованием для различных научных, технических целей и особенно их применением для целей управляемого термоядерного синтеза [1]. Поток отрицательно заряженных изотопов водорода, ускоренных до высоких энергий, может быть превращён в нейтральные атомы и инжектироваться в магнитные ловушки с целью решения проблемы нагрева плазмы до термоядерных температур. Отрицательно заряженные изотопы водорода, ускоренные до высоких энергий, используются в ускорителях различного типа, в частности, для получения радиоизотопов. Существенным преимуществом источников ионов, используемых для создания плазмы электронного циклотронного резонанса (ЭЦР), является отсутствие загрязнений плазмы материалом катода и их долговечность. Для ЭЦР источников отрицательных ионов водорода принципиально важной реакцией является присоединение низкоэнергетичных электронов к молекулам водорода с последующей диссоциацией отрицательно заряженных молекул [2]. Однако константа скорости такого процесса слишком мала для того, чтобы этот процесс использовать для практических целей. Но если молекулы водорода находятся в

сильно возбуждённом электронном или колебательном состоянии, то константа скорости процесса возрастает на много порядков. В ЭЦР источниках отрицательных ионов колебательное и электронное возбуждение молекул происходит в результате столкновения с энергичными электронами плазмы в активной зоне разряда. Молекулы водорода из основного состояния могут перейти на высоковозбуждённые колебательные состояния по механизму Франка–Кондона [3, 4] или на высоковозбуждённые электронные уровни [5, 6]. Было установлено, что в изучаемом ЭЦР источнике [2] отрицательные водородные ионы получают в соответствии с вышеуказанными реакциями. Магнитное поле источника зеркального типа, где ЭЦР поверхности, соответствующие основной микроволновой частоте и её гармоникам $B(\vec{r}) = mc\omega/ek$, имели однолистовую гиперболоидную форму [2, 7]. Здесь m и e — масса и заряд электрона, c — скорость света, ω — циклическая микроволновая частота, $k = 1$ соответствует основному резонансу, $k = 2, 3, 4$ — резонансные гармоники. В этих условиях формируются плазменные кольца высокоэнергичных электронов [2, 7–10]. Ускорение электронов до сверхвысоких энергий связано с явлением пространственного циклотронного авторезонанса [11, 12]. В [2] показано, в результате прямого контакта колец с электродами плазмы происходит бомбардировка электродов энергичными частицами колец и в результате вблизи электродов образуются слои низкоэнергичных электронов. Именно в этих слоях и образуются отрицательно заряженные ионы. В проведённой серии экспериментов ЭЦР источник, описанный в [2, 8], был модифицирован с целью получения более высокой степени генерации отрицательных ионов. В разрядной камере были установлены две системы, которые обогащали плазму источника дополнительными низкоэнергичными электронами.

2. Экспериментальная установка

Схема экспериментальной установки представлена на рис. 1.

Разрядная камера представляла собой алюминиевый цилиндр диаметром 13 см и длиной 8 см, размещённый между двумя одинаковыми SmCo_5 магнитными дисками диаметром 6 см и поверхностным магнитным полем 0,34 Тл. Оси магнитных дисков совпадали с осью разрядной камеры. Геометрия ЭЦР поверхностей и число ЭЦР однолистовых гиперболоидов определялись расстоянием между магнитными дисками, которое могло изменяться от 8,6 до 12 см. Таким образом могли меняться и радиусы плазменных колец. Сечения резонансных гиперболоидов и плазменных колец на рисунке изображены как $B_{c1}-B_{c4}$ и $k = \overline{1,4}$ соответственно. Мощность магнетрона (3) менялась в пределах 50–300 Вт на частоте 2,45 ГГц. В камере источника возбуждалась мода TE_{111} . Микроволновая мощность поступала в камеру источника через волновод и керамическое Al_2O_3 окно. Давление рабочего газа в камере поддерживалось с помощью пьезоэлектрического натекателя. Магнитное поле, соответствующее основному резонансу, равнялось 0,0875 Тл.

Для создания условий, способствующих генерации отрицательных водородных ионов, использовались два устройства. Первое устройство, которое поставляло в разряд низкоэнергичные электроны, состояло из четырёх вольфрамовых проволок длиной 8 см, обозначенных (6) на рис. 1 и 2. Эти проволоки устанавливались попарно на боковых поверхностях камеры на расстоянии 0,4 см от поверхности и были ориентированы перпендикулярно силовым линиям микроволнового электрического поля с целью минимизировать их влияние. Температура проволок поддерживалась на уровне не выше 2000 К, так как более высокая температура требовала бы дополнительных мер по отводу тепла от установки.

Второе устройство, предназначенное для получения низкоэнергичных электронов, представляло из себя дисковый эмиттер из гексаборида лантана (LaB_6) диаметром 4 мм (7), установленное на боковой стенке камеры, как показано на рис. 1 и 2. Выбор гексаборида лантана в качестве эмиттера электронов связан с небольшой работой выхода электронов (2,7 эВ), его нечувствительности к ионной бомбардировке и большому сроку службы. Тыльная сторона LaB_6 дисков нагревалась вольфрамовыми

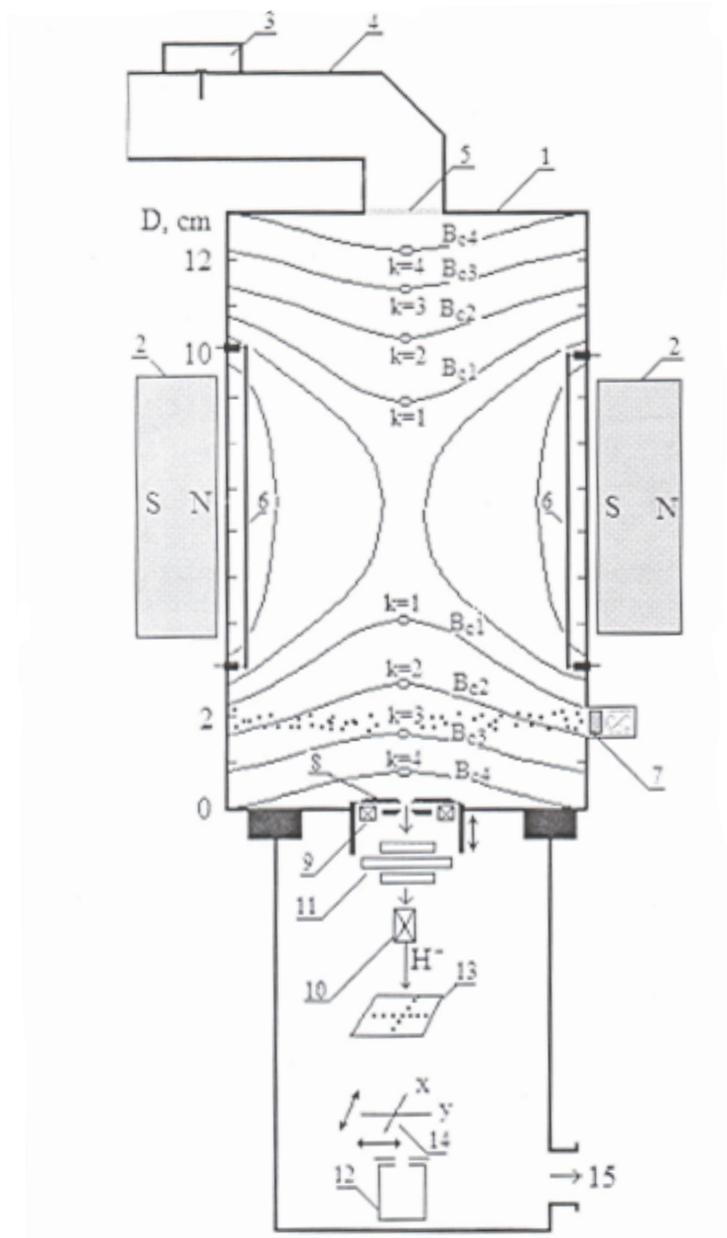


Рис. 1. Принципиальная схема ЭЦР источника ионов: 1 — разрядная камера; 2 — SmCo дисковые магниты; 3 — магнетрон; 4 — волновод; 5 — керамическое волноводное окно; 6 — вольфрамовая проволока; 7 — LaB эмиттер электронов; 8 — двухэлектродная система экстракции; 9 — корректирующие магниты; 10 — магниты, отклоняющие электроны; 11 — одиночная фокусирующая линза; 12 — цилиндр Фарадея; 13 — пластина эмиттанса; 14 — подвижная проволока; 15 — откачка; $B_{c1}-B_{c4}$ — изображение сечений резонансных гиперболоидов; $k = \overline{1,4}$ — изображение сечений резонансных колец

проволоками с помощью постоянного тока, величина которого определяла температуру поверхности LaB_6 . Вольфрамовая проволока помещалась в водоохлаждаемую трубку из нержавеющей стали длиной 1,2 см и внутренним диаметром 0,7 см.

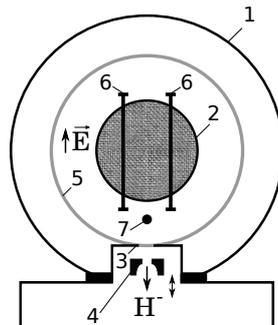


Рис. 2. Поперечное сечение камеры источника: 1 — боковая поверхность камеры; 2 — магнитные диски; 3 — электроды; 4 — электроды экстракции; 5 — плазменное кольцо; соответствующее резонансу $k = 3$; 6 — вольфрамовая проволока; 7 — LaB эмиттер электронов

Для экстракции отрицательно заряженных частиц использовалась подвижная двухэлектродная (плазменный электрод и электрод экстрактор) система (8), установленная на боковой поверхности камеры со стороны, противоположной подводу микроволновой мощности. В её состав входили корректирующие магниты (9), магниты (10), отклоняющие электроны, фокусирующие линзы (11). Экстрагированные ионы собирались с помощью цилиндра Фарадея (12). Камера и плазменный электрод были заземлены, а экстрагирующий электрод находился под потенциалом $+8$ кВ. Экстрагирующее отверстие имело диаметр 3 мм. Экстрагирующая система могла погружаться в плазму на расстояние 1,5 см. Система, предназначенная для формирования и экстракции пучка, детально описана в [2].

3. Обсуждение полученных результатов

Измерение электронной температуры и плотности плазмы показало, что между параметрами разрядной плазмы отсутствуют качественные различия в случае нагретых и не нагретых спиралей эмиссионных элементов. Как видно из рис. 3, при нагреве эмиссионных элементов расширяется диапазон давлений, при которых существует разряд в камере, увеличивается также плотность плазмы. При микроволновой мощности в 200 Вт диапазон давлений существования разряда увеличивался от (2,0–3,3) до (1,2–5,4) Па, а плотность плазмы возрастала от $1,0 \cdot 10^{11}$ до $1,2 \cdot 10^{11}$ см^{-3} . Этот эффект связан с влиянием термоэлектронов. Разряд и диапазон давлений существования разряда являлся очень стабильным, а система нагрева не влияла на температуру электронов, которая равнялась 55 ± 7 эВ.

Нагрев LaB_6 эмиттеров предназначался для обогащения области вблизи плазменных электродов (3) электронами с низкими энергиями. Термоэлектроны, полученные из LaB_6 , распространялись вдоль магнитных силовых линий, что предохраняло их от диффузии в объём, занимаемый плазмой. Плазменные электроды были погружены в плазму на глубину 1,2 см и находились в непосредственном контакте и с термоэлектронами и с плазменным кольцом, соответствующим третьей циклотронной гармонике ($k = 3$ на рис. 2). Таким образом решалась проблема увеличения низкоэнергетичных электронов в непосредственной близости от экстрагирующего отверстия.

Как отмечалось в работе [9], отрицательно заряженные водородные ионы появляются в двух принципиально важных реакциях.

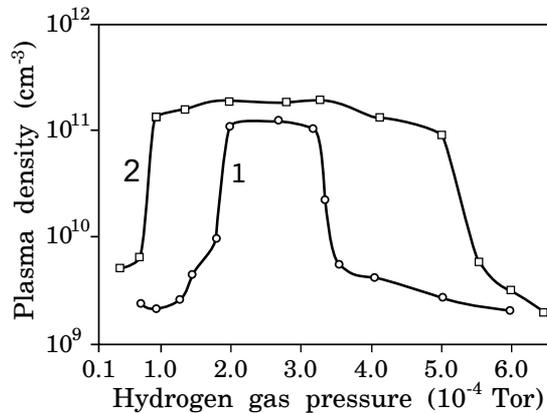
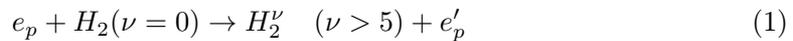
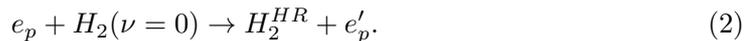


Рис. 3. Зависимость плотности плазмы от давления водорода в камере: 1 — холодные нагревательные элементы, 2 — нагретые элементы

На первой стадии вследствие электронных ударов в объёме плазмы происходит [3,4] образование высоковозбуждённых колебательных состояний молекул водорода $X^1\Sigma_g^+$

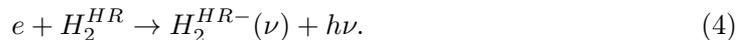


и высоковозбуждённых ридберговских электронных состояний [5, 6]:



Здесь e_p — электрон плазмы, H_2^ν — колебательно возбуждённая молекула водорода, $H_2(\nu = 0)$ — молекула в невозбуждённом колебательном состоянии $X^1\Sigma_g^+$ ($\nu = 0$), ν — колебательное квантовое число. Оптимальная температура электронов для обеих реакций около 50–60 эВ.

На второй стадии низкоэнергетические электроны присоединяются к возбуждённым молекулам:



Полученные возбуждённые отрицательно заряженные молекулы водорода нестабильны и диссоциируют на отрицательно заряженные атомы водорода H^- и возбуждённые атомы H^* :



Максимум распределения вторичных электронов, возникающих в разряде при столкновениях энергичных частиц плазмы с плазменными электродами, составлял примерно 20 эВ, что значительно превышает оптимальную энергию для реакций (3) и (4). В силу этих причин в экспериментах предполагалось, что дополнительные эмиттеры низкоэнергетичных термоэлектронов будут основными поставщиками электронов с оптимальной энергией, так как температура термоэлектронов такая же, как и температура эмиттера. Нагрев вольфрамовых термоэмиттеров (6) приводил к увеличению экстракции отрицательных ионов водорода, но оно составляло не более 5% [13]. Низкая эффективность термоэмиттеров объясняется тем, что они создавали низкоэнергетические электроны в плазменной области, удалённой от электродов

экстракции, куда поле электродов практически не проникало. Образованные отрицательные ионы разрушались горячими электронами по пути к электродам. Для улучшения условий осуществления реакций (5) в экспериментах использовались электроды из гексаборида лантана.

В экспериментах температура LaB_6 равнялась 1650 К, и средняя энергия термоэлектронов была примерно равна 0,13 эВ [14]. Возбуждённые молекулы водорода могли эффективно захватывать эти электроны, осуществляя реакцию (5).

Плотность термоэлектронов, рассчитанная для области, близкой к электроду экстракции, соответствовала $5 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-3}$, что в 5,5 раз больше, чем плотность вторичных электронов от колец горячих электронов [2]. Экспериментальное значение тока отрицательных ионов при этих условиях равнялось 10,2 мА, что в 3,2 раза превышало значение тока при не нагретом эмиттере.

Эксперименты при вариации магнитного поля в резонаторе и изменении положения электродов экстракции показали, что на процесс образования отрицательных ионов водорода термоэлектроны эмиттера оказывали более сильное влияние, чем вторичные электроны, образующиеся при столкновениях быстрых электронов плазмы с электродами.

Сравнение полученных результатов с работами других авторов [15] свидетельствует о высокой эффективности исследованного источника отрицательных ионов как по величине тока экстракции, так и по его энергоэффективности.

4. Заключение

В работе изучалось влияние эмиттированных в плазму разряда низкоэнергетических электронов на величину тока отрицательных водородных ионов из ЭЦР источника. Показано, что установленные должным образом LaB_6 эмиттеры формировали слои низкоэнергетических электронов вблизи поверхностей плазменных электродов, что приводило к значительному увеличению производства отрицательно заряженных ионов водорода. В экспериментах продемонстрировано, что вторичные электроны, получаемые в плазменных кольцах, значительно менее эффективны для получения отрицательных ионов вследствие их сравнительно высоких энергий. Полученные результаты позволяют сделать выводы для усовершенствования существующих ЭЦР источников ионов. Механизмы работы этих источников требуют как наличия электронов высоких энергий, необходимых для ионизации плазмы и колебательного и электронного возбуждения молекул, так и низкоэнергетических электронов для диссоциативного получения отрицательных ионов. Вследствие этого большую роль играет геометрия разрядной системы, позволяющая оптимизировать эти процессы. Для дальнейшего улучшения производительности источника следует стремиться к увеличению плотности низкоэнергетических электронов вблизи поверхности плазменных электродов. Этого можно добиться как изменением геометрии источника с целью приблизить термоэмиттеры к области экстракции, так и подбором оптимального материала эмиттеров.

Как уже отмечалось, существенную роль в процессе получения отрицательных ионов водорода играет колебательное возбуждения молекул, которое увеличивает константу скорости процесса получения отрицательных ионов на много порядков. Кроме столкновительных процессов в объёме плазмы к колебательному возбуждению молекул водорода приводят также поверхностные процессы на электродах. Приведённые в [15] данные о существенной зависимости ионного тока источника от материала поверхности разрядной камеры подтверждают вывод о перспективности исследований явлений на поверхности электродов для увеличения эффективности ЭЦР источников плазмы.

Перспективным каналом колебательного возбуждения молекул H_2 является взаимодействие между водородными атомными или молекулярными ионами H_2^+ и H_3^+ на металлической поверхности плазменной камеры [16, 17]. В результате рекомбинации на поверхности атомов газовой фазы могут образовываться колебательно возбуждённые молекулы водорода $\text{H}_2(\nu'')$ [18, 19]. Экспериментальные исследования [20]

подтверждают существенный вклад поверхностных процессов на производительность источника отрицательных ионов.

Литература

1. *Габович М. Д., Плешивцев Н. В., Семашко Н. Н.* Пучки ионов и атомов для управляемого термоядерного синтеза и технологических целей. — М., 1986.
2. *Dougar-Jabon V. D.* Production of Hydrogen and Deuterium Negative Ions in an Electron Cyclotron Resonance Driven Plasma // *Physica Scripta*. — 2001. — Vol. 63, No 4. — P. 322. — DOI: 10.1238/Physica.Regular.063a00322.
3. *Alan M., Wong S. F.* Effect of Vibrational and Rotational Excitation on Dissociative Attachment in Hydrogen // *Physical Review Letters*. — 1978. — Vol. 41, issue 26. — Pp. 1791–1794. — DOI: 10.1103/PhysRevLett.41.1791.
4. *Wadehra J. M., Bardsley J. N.* Vibrational and Rotational-State Dependence of Dissociative Attachment in e -H₂ Collisions // *Physical Review Letters*. — 1978. — Vol. 41, issue 26. — Pp. 1795–1798. — DOI: 10.1103/PhysRevLett.41.1795.
5. *Pinnaduwage L. A., Christophorou L. G.* H⁻ Formation in Laser-Excited Molecular Hydrogen // *Physical Review Letters*. — 1993. — Vol. 70, issue 6. — Pp. 754–757. — DOI: 10.1103/PhysRevLett.70.754.
6. *Datscos P. G., Pinnaduwage L. A., Kielkopf J. F.* Electron Attachment to Photofragments and Rydberg States in Laser-Irradiated CCl₂F₂ // *Journal of Applied Physics*. — 1998. — Vol. 84, issue 7. — P. 3442. — DOI: 10.1063/1.368518.
7. *Dougar-Jabon V. D., Reznikov D. V., Santos Mayorga R.* Influence of an Electron-Beam Injection on Ions Charge State Distribution in an ECR Source at 2.4 GHz // *Proc. Int. Conf. on Phenomena in Ionized Gases*. — 1991.
8. *Dougar-Jabon V. D., Chacon Velasco A. J., Vivas F. A.* Hydrogen Negative Ion Production in an Electron Cyclotron Resonance Driven Plasma // *Review of Scientific Instruments*. — 1998. — Vol. 69, issue 2. — P. 950. — DOI: 10.1063/1.1148618.
9. *Dougar-Jabon V. D.* X-ray Source Based on Electron Cyclotron Resonance Discharge in a Magnetic Mirror Trap // *Physica Scripta*. — 2004. — Vol. 69, No 4. — P. 313. — DOI: 10.1238/Physica.Regular.069a00313.
10. Shell Structure of a Hot-Electron Plasma / *H. Ikegami, M. Ikezi, S. Tanaka, K. Takayama* // *Physical Review Letters*. — 1967. — Vol. 19. — P. 778. — DOI: 10.1103/PhysRevLett.19.778.
11. *Dugar-Zhabon V., Oronzco E.* Cyclotron Spatial Autoresonance Acceleration Model // *Physical Review Accelerators and Beams*. — 2009. — Vol. 12, issue 4. — P. 041301. — DOI: 10.1103/PhysRevSTAB.12.041301.
12. *Dugar-Zhabon V., Oronzco E.* Three-Dimensional Particle-In-Cell Simulation of Spatial Autoresonance Electron-Beam Motion // *IEEE Transactions on Plasma Science*. — 2010. — Vol. 38, issue 10. — Pp. 2980–2984. — DOI: 10.1109/TPS.2010.2060362.
13. *Дугар-Жабон В. Д., Каряка В. И.* Увеличение потока отрицательных водородных ионов из ЭЦР источника плазмы с помощью низкотемпературных электронов // LI Всероссийская конф. по проблемам динамики, физики частиц, физики плазмы и оптоэлектроники. — М.: 2015. — С. 233.
14. *Дугар-Жабон В. Д., Каряка В. И.* Улучшение производительности ЭЦР источника отрицательных водородных ионов с помощью дополнительных эмиттеров низкотемпературных электронов // LII Всероссийская конф. по проблемам динамики, физики частиц, физики плазмы и оптоэлектроники. — М.: 2016. — С. 170.
15. *Tarvainen O., Peng S. X.* Radiofrequency and 2.45 GHz Electron Cyclotron Resonance H⁻ Volume Production Ion Sources // *New Journal of Physics*. — 2016. — Vol. 18, No 10. — P. 105008. — DOI: 10.1088/1367-2630/18/10/105008.
16. *Bacal M., Wada M.* Negative Hydrogen Ion Production Mechanisms // *Applied Physics Reviews*. — 2015. — Vol. 2, No 2. — P. 021305. — DOI: 10.1063/1.4921298.

17. *Hiskes J. R., Karo A. M.* Recombination and Dissociation of H_2^+ and H_3^+ Ions on Surfaces to Form $H_2(\nu')$: Negative Ion Formation on Low-Work-Function Surfaces // *Journal of Applied Physics*. — 1990. — Vol. 67, No 11. — Pp. 6621–6632. — DOI: 10.1063/1.345095.
18. *Capitelli M., Bruno D., Laricchiuta A.* Fundamental Aspects of Plasma Chemical Physics Transport. — New York: Springer, 2016. — DOI: 10.1007/978-1-4419-8185-1.
19. Vibrational Excitation of Hydrogen via Recombinative Desorption of Atomic Hydrogen Gas on a Metal Surface / R. I. Hall, I. Čadež, M. Landau et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 1988. — Vol. 60, No 4. — Pp. 337–340. — DOI: 10.1103/PhysRevLett.60.337.
20. *An Y., Cho W., Chung K.* Wave Frequency Dependence of H^- Ion Production and Extraction in a Transformer Coupled Plasma H^- Ion Source at SNU // *Review of Scientific Instruments*. — 2012. — Vol. 83, No 2. — P. 02A727. — DOI: 10.1063/1.3678659.

UDC 537.5

DOI: 10.22363/2312-9735-2018-26-3-216-225

The Increase of Negative Hydrogen Ions Production in ECR Source by use of the Additional Low-Temperature Emitters of Electrons

V. D. Dugar-Jabon*, V. I. Karyaka†, A. Ya. Terletsy†

* *Industrial University of Santander*
AA 678 Bucaramanga, Colombia

† *Institute of Physical Research and Technologies*
Peoples' Friendship University of Russia (RUDN university)
6, Miklukho-Maklaya str., Moscow, 117198, Russian Federation

Analysis of the mechanisms of formation of negative hydrogen ions in the plasma source, operating at the electron cyclotron resonance, leads to the conclusion about the fundamentally important role played in this process by low-temperature electrons. In the source the negative ion production is realized in two stages. First, hydrogen molecules colliding in a plasma with energetic electrons, are excited to high-lying Rydberg electron states and to high vibration levels in the plasma volume. Further, pulling the low-energy electrons, excited molecules acquire a negative charge. Negative atomic ions result from dissociation of excited negatively charged hydrogen molecules. Necessary for this process, the electrons of low energies are the result of collisions of fast plasma electrons with plasma electrodes. In the presented experiments to further increase the number of low-energy electrons were used electrons, emitted from the heated tungsten filaments and ceramic electrodes LaB_6 placed in the chamber of the source. The experiments found that emission of electrons from tungsten heaters have improved stability of the discharge and expanded the range of pressure under which there was a discharge, without changing substantially the magnitude of current of negative ions. The emission of electrons from the LaB_6 electrodes increased the current of negative ions from a source more than 3 times.

Key words and phrases: source of negative ions, electron cyclotron resonance, electron emission, dissociation, vibrational excitation of molecules, electronic excitation

References

1. M. D. Gabovich, N. V. Pleshivtsev, N. N. Semashko, *Beams of Ions and Atoms for Connection of Thermonuclear Fusion and Technological Purposes*, Moscow, 1986, in Russian.
2. V. D. Dugar-Jabon, Production of Hydrogen and Deuterium Negative Ions in an Electron Cyclotron Resonance Driven Plasma, *Physica Scripta* 63 (4) (2001) 322. doi:10.1238/Physica.Regular.063a00322.
3. M. Alan, S. F. Wong, Effect of Vibrational and Rotational Excitation on Dissociative Attachment in Hydrogen, *Physical Review Letters* 41 (1978) 1791–1794. doi:10.1103/PhysRevLett.41.1791.

4. J. M. Wadehra, J. N. Bardsley, Vibrational and Rotational-State Dependence of Dissociative Attachment in e - H_2 Collisions, *Physical Review Letters* 41 (1978) 1795–1798. doi:10.1103/PhysRevLett.41.1795.
5. L. A. Pinnaduwege, L. G. Christophorou, H^- Formation in Laser-Excited Molecular Hydrogen, *Physical Review Letters* 70 (1993) 754–757. doi:10.1103/PhysRevLett.70.754.
6. P. G. Datscos, L. A. Pinnaduwege, J. F. Kielkopf, Electron Attachment to Photofragments and Rydberg States in Laser-Irradiated CCl_2F_2 , *Journal of Applied Physics* 84 (1998) 3442. doi:10.1063/1.368518.
7. V. D. Dougar-Jabon, D. V. Reznikov, R. Santos Mayorga, Influence of an Electron-Beam Injection on Ions Charge State Distribution in an ECR Source at 2.4 GHz, in: *Proc. Int. Conf. on Phenomena in Ionized Gases*, 1991.
8. V. D. Dougar-Jabon, A. J. Chacon Velasco, F. A. Vivas, Hydrogen Negative Ion Production in an Electron Cyclotron Resonance Driven Plasma, *Review of Scientific Instruments* 69 (1998) 950. doi:10.1063/1.1148618.
9. V. D. Dougar-Jabon, X-ray Source Based on Electron Cyclotron Resonance Discharge in a Magnetic Mirror Trap, *Physica Scripta* 69 (4) (2004) 313. doi:10.1238/Physica.Regular.069a00313.
10. H. Ikegami, M. Ikezi, S. Tanaka, K. Takayama, Shell Structure of a Hot-Electron Plasma, *Physical Review Letters* 19 (1967) 778. doi:10.1103/PhysRevLett.19.778.
11. V. Dugar-Zhabon, E. Oronzco, Cyclotron Spatial Autoresonance Acceleration Model, *Physical Review Accelerators and Beams* 12 (2009) 041301. doi:10.1103/PhysRevSTAB.12.041301.
12. V. Dugar-Zhabon, E. Oronzco, Three-Dimensional Particle-In-Cell Simulation of Spatial Autoresonance Electron-Beam Motion, *IEEE Transactions on Plasma Science* 38 (2010) 2980–2984. doi:10.1109/TPS.2010.2060362.
13. V. Dugar-Zhabon, V. I. Karyaka, An Increase in the Flux of Negative Hydrogen Ions from the ECR of the Plasma Source by Means of Low-Temperature Electrons, in: *LI All-Russia Conference on Problems in Dynamics, Particle Physics, Plasma Physics and Optoelectronics*, Moscow, 2015, p. 233, in Russian.
14. V. Dugar-Zhabon, V. I. Karyaka, Improving the Productivity of an ECR Source of Negative Hydrogen Ions by Means of Additional Emitters of Low-Temperature Electrons, in: *LII All-Russia Conference on Problems in Dynamics, Particle Physics, Plasma Physics and Optoelectronics*, Moscow, 2016, p. 170, in Russian.
15. O. Tarvainen, S. X. Peng, Radiofrequency and 2.45 GHz Electron Cyclotron Resonance H^- Volume Production Ion Sources, *New Journal of Physics* 18 (10) (2016) 105008. doi:10.1088/1367-2630/18/10/105008.
16. M. Bacal, M. Wada, Negative Hydrogen Ion Production Mechanisms, *Applied Physics Reviews* 2 (2) (2015) 021305. doi:10.1063/1.4921298.
17. J. R. Hiskes, A. M. Karo, Recombination and Dissociation of H_2^+ and H_3^+ Ions on Surfaces to Form $H_2(\nu')$: Negative Ion Formation on Low-Work-Function Surfaces, *Journal of Applied Physics* 67 (11) (1990) 6621–6632. doi:10.1063/1.345095.
18. M. Capitelli, D. Bruno, A. Laricchiuta, *Fundamental Aspects of Plasma Chemical Physics Transport*, Springer, New York, 2016. doi:10.1007/978-1-4419-8185-1.
19. R. I. Hall, I. Čadež, M. Landau, F. Pichou, S. C., Vibrational Excitation of Hydrogen via Recombinative Desorption of Atomic Hydrogen Gas on a Metal Surface, *Phys. Rev. Lett.* 60 (4) (1988) 337–340. doi:10.1103/PhysRevLett.60.337.
20. Y. An, W. Cho, K. Chung, Wave Frequency Dependence of H^- Ion Production and Extraction in a Transformer Coupled Plasma H^- Ion Source at SNU, *Review of Scientific Instruments* 83 (2) (2012) 02A727. doi:10.1063/1.3678659.

Для цитирования:

Дугар-Жабон В. Д., Каряка В. И., Терлецкий А. Я. Увеличение производительности ЭЦР источника отрицательных водородных ионов с помощью дополнительных эмиттеров низкотемпературных электронов // Вестник Российского университета дружбы народов. Серия: Математика. Информатика. Физика. — 2018. — Т. 26, № 3. — С. 216–225. — DOI: 10.22363/2312-9735-2018-26-3-216-225.

For citation:

Dugar-Jabon V. D., Karyaka V. I., Terletsky A. Ya. The Increase of Negative Hydrogen Ions Production in ECR Source by use of the Additional Low-Temperature Emitters of Electrons, RUDN Journal of Mathematics, Information Sciences and Physics 26 (3) (2018) 216–225. DOI: 10.22363/2312-9735-2018-26-3-216-225. In Russian.

Сведения об авторах:

Дугар-Жабон Валерий Дондокович — профессор, кандидат физико-математических наук, профессор Индустриального университета Сантандер (e-mail: vdougar@uis.edu.co, тел.: +7 (903) 5557774)

Каряка Владимир Иванович — доцент, кандидат физико-математических наук, доцент Института физических исследований и технологий РУДН (e-mail: volkar2@mail.ru, тел.: +7(916) 9941426)

Терлецкий Александр Яковлевич — доцент, кандидат физико-математических наук, доцент Института физических исследований и технологий РУДН (e-mail: veselovich50@mail.ru, тел.: +7(916) 4630628)

Information about the authors:

Dugar-Jabon V. D. — Professor, Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Professor of Industrial University of Santander (e-mail: vdougar@uis.edu.co, phone: +7 (903) 5557774)

Karyaka V. I. — Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor of Institute of Physical Researches and Technologies of Peoples' Friendship University of Russia (RUDN university) (e-mail: volkar2@mail.ru, phone: +7(916) 9941426)

Terletsky A. Ya. — Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor of Institute of Physical Researches and Technologies of Peoples' Friendship University of Russia (RUDN university) (e-mail: veselovich50@mail.ru, phone: +7(916) 4630628)



UDC 519.632.4

DOI: 10.22363/2312-9735-2018-26-3-226-243

Finite Element Method of High-Order Accuracy for Solving Two Dimensional Elliptic Boundary-Value Problems of Two and Three Identical Atoms in a Line

A. A. Gusev

*Laboratory of Information Technologies
Joint Institute for Nuclear Research
6, Joliot-Curie str., Dubna, Moscow region, Russia, 141980*

We considered models of three identical atoms in a line with molecular pair interactions and diatomic molecule scattered by an atom or tunneling through potential barriers. The models are formulated as 2D elliptic boundary-value problems (BVPs) in the Jacobi and polar coordinates. The BVP in Jacobi coordinates solved by finite element method of high-order accuracy for discrete spectrums of models under consideration. To solve the scattering problems the BVP in polar coordinates are reduced by means of Kantorovich method to a system of second-order ordinary differential equations with respect to the radial variable using the expansion of the desired solutions in the set of angular basis functions that depend on the radial variable as a parameter. The efficiency of the elaborated method, algorithms and programs is demonstrated by benchmark calculations of the resonance scattering, metastable and bound states of the considered models and also by a comparison of results for bound states of the three atomic system in the framework of direct solving the BVP by FEM and Kantorovich reduction.

Key words and phrases: Elliptic Boundary-Value Problems, scattering problem, metastable and bound states, Kantorovich method

1. Introduction

With the development of modern computing power, there are more possibilities for setting and numerically solving multidimensional boundary-value problems with high accuracy. For this, new numerical methods of high accuracy order are being developed. When reducing the boundary value problem to an algebraic one in the finite element method (FEM) of order p , one of the problems is the calculation of integrals on a finite element (we consider only simplicial finite elements) containing the products of two basis functions of Lagrange or Hermite interpolation polynomials of order p by the coefficients for the unknown functions [1–3]. The FEM schemes and algorithms for solving the d -dimensional BVP are presented in [4–6]. The algorithms for constructing 2-dimensional fully symmetric Gaussian quadratures are presented in [7] while d -dimensional ones will be published elsewhere.

The aim of this paper is to demonstrate the efficiency of the elaborated algorithms and program complexes KANTBP 4M, KANTBP 3, ODPEVP [8–10] by benchmark calculations of the resonance scattering below the dissociation threshold, metastable and bound states of the considered models and also by a comparison of results for bound states of the three atomic system in the framework of direct solving BVP by 2D FEM [3,7] and Kantorovich method (KM).

We elaborated also algorithms for calculating the asymptotic parametric angular functions, the effective potentials and the fundamental solutions of the SODEs in the form of expansions by inverse powers of radial variable [11] and apply them to the construction of the asymptotic states of the triatomic scattering problem, because in three-atomic systems at large values of the hyperradial variable the effective potentials of SODEs have

Received 27th May, 2018.

The author thank Profs. O. Chuluunbaatar, V. L. Derbov, V. P. Gerdt, S. I. Vinitzky and Dr. L. L. Hai for collaboration. The work was supported by the RFBR (grants No. 16-01-00080 and 18-51-18005).

the form of expansions in inverse powers of hyperradius even for short-range potentials of pair interactions.

The paper is organized as follows. In Section 2 we formulate the 2D BVP for the dimer and trimer models. In Section 3 the 2D BVP in polar coordinates is reduced to the SODEs. In Sections 4, 5 and 6 we demonstrate the efficiency of the elaborated technique by test calculations of the resonance scattering of a diatomic molecule on an atom, the metastable and bound states of three atomic system, and the resonance tunneling of a diatomic molecule through a Gaussian barrier and the metastable states, respectively. In Conclusion the results and perspectives are discussed.

2. Setting of the Problem

Consider a model of three identical particles (trimer) on a straight line with the masses $M_i = M$ and the coordinates $\bar{x}_i \in \mathbf{R}^1$, $i = 1, 2, 3$, of one-dimensional Euclidian space \mathbf{R}^1 coupled via the pair short-range potential $\tilde{V}(|\bar{x}_i - \bar{x}_j|)$, $i, j = 1, 2, 3$. Performing the change of variables corresponding to the cyclic permutation $(\alpha, \beta, \gamma) = (1, 2, 3)$ of the permutation group S_3 [12]:

$$x_\gamma \equiv x_{(\alpha\beta)} = \bar{x}_\beta - \bar{x}_\alpha, \quad y_\gamma \equiv y_{(\alpha\beta)\gamma} = \frac{\bar{x}_\alpha + \bar{x}_\beta - 2\bar{x}_\gamma}{\sqrt{3}}, \quad x_0 = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}}(\bar{x}_1 + \bar{x}_2 + \bar{x}_3),$$

we get three pairs $(x_{(\alpha\beta)}, y_{(\alpha\beta)\gamma})^T$ of the scaled Jacobi variables. In the center-of-mass reference frame of the configuration space $\bar{\mathbf{x}} = (\bar{x}_1, \bar{x}_2, \bar{x}_3) \in \mathcal{R}^3$, i.e., on the hyperplane $\Omega = \{\bar{\mathbf{x}} = (\bar{x}_1, \bar{x}_2, \bar{x}_3) | \bar{x}_1 + \bar{x}_2 + \bar{x}_3 = 0\} \subset \mathcal{R}^3$ these Jacobi maps $(x, y)^T \in \Omega_{xy} \sim \mathcal{R}^2$ are connected by the relations:

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} x_\gamma \\ y_\gamma \end{pmatrix} &\equiv \begin{pmatrix} x_{(\alpha\beta)} \\ y_{(\alpha\beta)\gamma} \end{pmatrix} = \mathbf{T}_{xy}(\varphi_{\gamma\alpha}) \begin{pmatrix} x_\alpha \\ y_\alpha \end{pmatrix}, \\ \mathbf{T}_{xy}(\varphi_{\gamma\alpha}) &= \begin{pmatrix} \cos \varphi_{\gamma\alpha} & \sin \varphi_{\gamma\alpha} \\ -\sin \varphi_{\gamma\alpha} & \cos \varphi_{\gamma\alpha} \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (1)$$

where the angles $\varphi_{\gamma\alpha} = \varphi_{\alpha\beta} = \varphi_{\beta\gamma} = -\varphi_{\alpha\gamma} = -\varphi_{\beta\alpha} = -\varphi_{\gamma\beta} = (2\pi)/3$, i.e. $\cos \varphi_{\gamma\alpha} = \cos \varphi_{\alpha\beta} = \cos \varphi_{\beta\gamma} = -1/2$, $\sin \varphi_{\gamma\alpha} = \sin \varphi_{\alpha\beta} = \sin \varphi_{\beta\gamma} = \sqrt{3}/2$, are such that $\varphi_{\gamma\alpha} + \varphi_{\alpha\beta} + \varphi_{\beta\gamma} = 2\pi$, $\varphi_{\alpha\gamma} + \varphi_{\beta\alpha} + \varphi_{\gamma\beta} = -2\pi$. With the variable parameter φ in $\mathbf{T}_{xy}(\varphi)$ they and simply change the sign of pairs of Jacobi coordinates in Eq. (1),

$$\begin{pmatrix} -x_{(\alpha\beta)} \\ -y_{(\alpha\beta)\gamma} \end{pmatrix} = \mathbf{T}_{xy}(\varphi_{\gamma\alpha} \pm \pi) \begin{pmatrix} x_{(\beta\gamma)} \\ y_{(\beta\gamma)\alpha} \end{pmatrix}. \quad (2)$$

In Fig. 1 (a) the hyperplane $(x, y)^T \in \Omega_{xy}$ is separated by three axes $y_{(12)3}$, $y_{(31)2}$ and $y_{(23)1}$ into six sectors that together with three orthogonal axes x_{12} , x_{31} , x_{23} describe six channels of the scattering problem for three identical particles. Our choice is determined by the parameterization of the pairs $(y, x)^T = (\rho \cos \varphi, \rho \sin \varphi)^T$, where the angle $\varphi \in [0, 2\pi)$ is counted counterclockwise from the axis $y_{(12)3}$, for which $\varphi = 0$.

As a result, we arrive at the Schrödinger equation for the wave function $\Psi(y, x)$ corresponding to the total energy E of the triatomic system in Jacobi coordinates $(x, y)^T = (x_\gamma, y_\gamma)^T \in \Omega_{xy}$:

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial y^2} - \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{M}{\hbar^2}(\tilde{V}(x, y) - \tilde{E}) \right) \Psi(y, x) = 0. \quad (3)$$

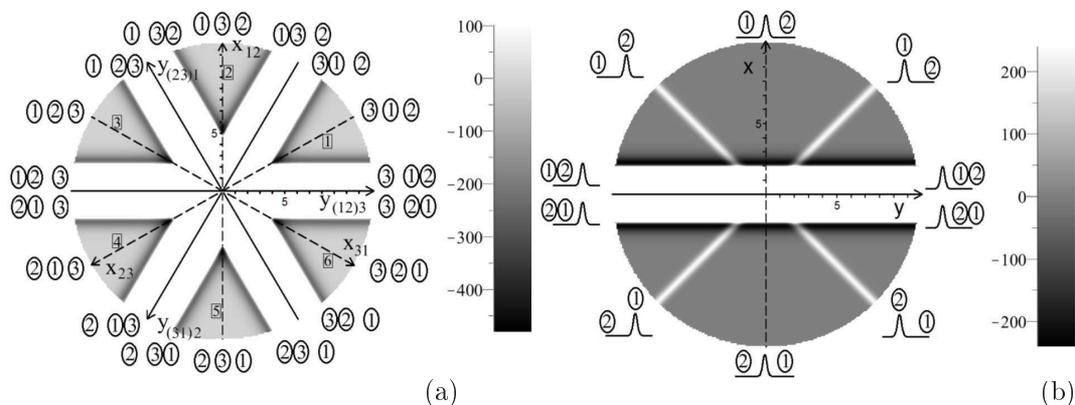


Figure 1. (a) The profiles of 2D potential functions of Be_3 in Jacobi coordinates (1) in the center-of-mass plane and the relative arrangement of particles in accordance with the region of the center-of-mass plane. The numbers of sectors are given in boxes. (b) The profiles of 2D potential functions of Be_2 with barrier and the relative arrangement of particles and barrier. Here coordinates and potential functions are given in \AA and \AA^{-2} , respectively

In the case of a diatomic molecule (dimer) with identical nuclei coupled via the pair potential, $\tilde{V}(|\bar{x}_1 - \bar{x}_2|)$, moving in the external potential field $\tilde{V}^b(|\bar{x}_i - \bar{x}_3|)$, $i = 2, 1$, of the third atom having the infinite mass, the same equation (3) is valid for the variables

$$x \equiv x_3 = \bar{x}_2 - \bar{x}_1, \quad y \equiv y_3 = \bar{x}_1 + \bar{x}_2,$$

with respect to the origin of the coordinate frame placed at the infinite-mass atom, $\bar{x}_3 = 0$.

Here the potential function for the trimer with the pair potentials (below this case is referred to as *Task 2*, for example, see Fig. 1 (a)),

$$\tilde{V}(x, y) = \tilde{V}(|x|) + \tilde{V}\left(\left|\frac{x - \sqrt{3}y}{2}\right|\right) + \tilde{V}\left(\left|\frac{x + \sqrt{3}y}{2}\right|\right), \quad (4)$$

or the potential function for a dimer in the field of a barrier potential (below this case is referred to as *Task 3*, see Fig. 1 (b))

$$\tilde{V}(x, y) = \tilde{V}(|x|) + \tilde{V}^b\left(\left|\frac{x - y}{2}\right|\right) + \tilde{V}^b\left(\left|\frac{x + y}{2}\right|\right), \quad (5)$$

is an even function with respect to the straight line $x = 0$ (i.e., $\bar{x}_1 = \bar{x}_2$), which allows one to consider the solutions of the problem in the half-plane $x \geq 0$. The use of the Dirichlet or Neumann boundary condition at $x = 0$ allows one to obtain the solutions, symmetric and antisymmetric with respect to the permutation of two particles. If the pair potential possesses a high peak at the pair collision point, then the solution of the problem in the vicinity of $x = 0$ is exponentially small and can be considered in the half-plane $x \geq x_{\min}$. In this case the Neumann or Dirichlet boundary condition imposed at x_{\min} yields only a minor contribution to the solution. The equation, describing the diatomic molecular subsystem (dimer) (below this case is referred to as *Task 1*), has the form

$$\left(-\frac{d^2}{dx^2} + \frac{M}{\hbar^2}(\tilde{V}(|x|) - \tilde{\varepsilon})\right) \phi(x) = 0. \quad (6)$$

We assume the energy spectrum of the dimer to consist of the discrete part with a finite number $n_0 \geq 1$ of bound states with the eigenfunctions $\phi_j(x)$, $j = \overline{1, n_0}$ and the eigenvalues $\tilde{\varepsilon}_j = -|\tilde{\varepsilon}_j| < 0$, and the continuous part with the eigenvalues $\tilde{\varepsilon} > 0$ and the corresponding eigenfunctions $\phi_{\tilde{\varepsilon}}(x)$. In certain cases the eigenfunctions of the continuous spectrum are approximated by the eigenfunctions of pseudostates of the discrete spectrum $\tilde{\varepsilon}_j > 0$, $j = 1 + n_0, \dots$ calculated in the sufficiently large but finite interval $x \in [x_{\min}, x_{\max}]$.

The approach proposed below is illustrated by the example of Be_2 with the reduced mass $M/2 = 4.506$ Da of the nuclei [13] and the molecular interaction approximated by the Morse potential

$$V(x) = \frac{M}{\hbar^2} \tilde{V}(x), \quad \tilde{V}(x) = \tilde{D} \{ \exp[-2(x - \hat{x}_{eq})\alpha] - 2 \exp[-(x - \hat{x}_{eq})\alpha] \}. \quad (7)$$

Here $\alpha = 2.96812 \text{ \AA}^{-1}$ is the potential well width, $\hat{x}_{eq} = 2.47 \text{ \AA}$ is the average distance between the nuclei, and $\tilde{D} = 1280 \text{ K}$, $D = (M/\hbar^2)\tilde{D} = 236.51 \text{ \AA}^{-2}$ ($1 \text{ K} = 0.184766 \text{ \AA}^{-2}$, $1 \text{ \AA}^{-2} = 5.412262 \text{ K}$) is the potential well depth. This potential supports only five bound states corresponding to the covalent bounding of the Be_2 dimer [14] having the energies $\varepsilon_i = (M/\hbar^2) \tilde{\varepsilon}_i$, $i = 1, \dots, n_0 = 5$. The parameter values are determined from the condition $(\tilde{\varepsilon}_2 - \tilde{\varepsilon}_1) / (2\pi\hbar c) = 277.124 \text{ cm}^{-1}$, $1 \text{ K} / (2\pi\hbar c) = 0.69503476 \text{ cm}^{-1}$. To solve the discrete spectrum problem we applied the seventh-order FEM using the Hermitian interpolation polynomials with double nodes [8]: $\varepsilon_i = \{-193.066, -119.392, -63.338, -24.904, -4.089\} \text{ \AA}^{-2}$, $i = 1, \dots, n_0 = 5$. As an example, following [13], we use below the Gaussian barrier potentials $V^b(x_i) = D \exp(-x_i^2/\sigma)$ with $D = 236.51 \text{ \AA}^{-2}$ and $\sigma = 0.0523 \text{ \AA}^2$. The values of parameters of the repulsive Gaussian barrier potential were estimated following the experimental observation of the quantum diffusion of hydrogen atoms on the copper surface [15].

3. Boundary-Value Problems

Using the change of variables $x = \rho \sin \varphi$, $y = \rho \cos \varphi$, we rewrite Eq. (3) in polar coordinates (ρ, φ) , $\Omega_{\rho, \varphi} = (\rho \in (0, \infty), \varphi \in (0, 2\pi))$

$$\left(-\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \Delta(\varphi, \rho) - E \right) \Psi(\varphi, \rho) = 0, \quad \Delta(\varphi, \rho) = -\frac{d^2}{d\varphi^2} + \rho^2 V(\varphi, \rho), \quad (8)$$

where for a trimer with pair potentials

$$V(\varphi, \rho) = V(\rho |\sin \varphi|) + V(\rho |\sin(\varphi - 2\pi/3)|) + V(\rho |\sin(\varphi - 4\pi/3)|), \quad (9)$$

and for a dimer with pair potential in the external field of barrier potential:

$$V(\varphi, \rho) = V(\rho |\sin \varphi|) + V^b(\rho |\sin(\varphi - \pi/4)|) + V^b(\rho |\sin(\varphi + \pi/4)|). \quad (10)$$

where $V^b(\rho |\sin(\varphi \pm \pi/4)|) = D \exp(-\rho^2 \sin^2(\varphi \pm \pi/4)/\sigma)$.

The solution of Eq. (8) is sought in the form of the Kantorovich expansion [16]

$$\Psi_{i_o}(\varphi, \rho) = \sum_{j=1}^{j_{\max}} \phi_j(\varphi; \rho) \chi_{j i_o}(\rho). \quad (11)$$

Here $\chi_{j i_o}(\rho)$ are unknown matrix functions, $j = 1, \dots, j_{\max} = 2N$. The angular basis functions $\phi_j(\varphi; \rho) \in \mathcal{F}_\rho \sim L_2(\Omega)$ in the interval $\Omega = \varphi \in [0, 2\pi)$, which is divided into s_{\max}

subintervals $\Omega_s = \varphi \in (2\pi(s-1)/s_{\max}, 2\pi s/s_{\max})$: $\Omega_{\rho;\varphi} = \bigcup_{s=1}^{s_{\max}} \Omega_s$, are determined at each value of the parameter $\rho \in (0, +\infty)$ as the eigenfunctions corresponding to the real discrete eigenvalues $\varepsilon_1(\rho) < \varepsilon_2(\rho) < \dots < \varepsilon_j(\rho) < \dots$ of the Sturm–Liouville problem for the equation

$$(\Lambda(\varphi, \rho) - \varepsilon_j(\rho))\phi_j(\varphi; \rho) = 0. \quad (12)$$

The functions $\phi_j^{(p)}(\varphi; \rho) \equiv \phi_j(\varphi; \rho)$ have the parity $(-1)^p$, $p = 0, 1$ with respect to the inversion of Jacobi coordinates (2), i.e., $\phi_j^{(p)}(\varphi; \rho) = (-1)^p \phi_j^{(p)}(\varphi \pm \pi; \rho)$; here and below $p = 0$. These functions satisfy the orthogonality and completeness conditions

$$\langle \phi_i | \phi_j \rangle = \sum_{s=1}^{s_{\max}} \int_{2\pi(s-1)/s_{\max}}^{2\pi s/s_{\max}} d\varphi \phi_i(\varphi; \rho) \phi_j(\varphi; \rho) = \delta_{ij}, \quad (13)$$

$$\sum_i |\phi_i\rangle \langle \phi_i| = \sum_i \phi_i(\varphi; \rho) \phi_i(\varphi_0; \rho) = \delta(\varphi - \varphi_0). \quad (14)$$

For the three problems under consideration the potential function $V(\varphi, \rho)$ depending on the parameter ρ can be defined as follows.

Task 1. The case of one pair potential in the intervals $\varphi \in (0, 2\varphi_\alpha)$ ($\varphi_\alpha = \pi/6, \pi/4$ or $\pi/2$) $V(\varphi, \rho) = V(\rho \sin \varphi)$.

Task 2. The case of three pair potentials, Eq. (9), in the interval $\varphi \in (0, 2\varphi_\alpha = \pi/3)$; the potential has the symmetry of the D_{3h} dihedral point group [12].

Task 3. The case of one pair potential and two penetrable or almost impenetrable barriers, Eq. (10), in the interval $\varphi \in (0, \varphi_\alpha = \pi/2)$ or in the intervals $\varphi \in (0, \varphi_\alpha = \pi/4 - \epsilon)$ and $\varphi \in (\varphi_\alpha = \pi/4 - \epsilon, \pi/2)$, $0 < \epsilon \ll \pi/4$.

The solutions symmetric with respect to the permutation of two particles satisfy the Neumann boundary condition at $\varphi = 0$ and $\varphi = 2\varphi_\alpha$, while the antisymmetric ones satisfy the Dirichlet boundary condition at these points, i.e., at the aforementioned points $x = x_{\alpha\beta} = 0$. If the pair potential possesses a high peak in the vicinity of the pair collision point, then the solution of the problem (8) will be considered in the half-plane $\Omega_{\varphi,\rho} = (\rho \in (\rho_{\min}, \infty), \varphi \in [\varphi_{\min}(\rho), 2\varphi_\alpha - \varphi_{\min}(\rho)])$ with the Neumann or Dirichlet boundary condition.

The potential function $V(\varphi, \rho)$ of the boundary-value problem (12) is symmetric under the reflection \hat{I}_α : $\varphi \rightarrow (4s-2)\varphi_\alpha - \varphi$ with respect to the lines $\varphi = (2s-1)\varphi_\alpha$ in each sector of the cycle, numbered by $s = 1, \dots, s_{\max}$: $\hat{I}_\alpha V(\varphi, \rho) = V(\varphi, \rho)$. Therefore, the set of eigenfunctions $\phi_j(\varphi; \rho)$ is separated into two subsets, namely, the even and odd $\phi_j^{\sigma=\pm 1}(\varphi; \rho)$ ones: $\hat{I}_\alpha \phi_j^\sigma(\varphi; \rho) = \phi_j^\sigma((4s-2)\varphi_\alpha - \varphi; \rho) = \pm \phi_j^{\sigma=\pm 1}(\varphi; \rho)$. This fact allows separate calculation of *gerade* $\phi_j^g(\varphi; \rho) = \phi_j^g((4s-2)\varphi_\alpha - \varphi; \rho)$ or *ungerade* $\phi_j^u(\varphi; \rho) = -\phi_j^u((4s-2)\varphi_\alpha - \varphi; \rho)$ eigenfunctions in the reduced interval $\varphi \in [\varphi_{\min}(\rho), \varphi_\alpha]$, subjecting them to Neumann or Dirichlet boundary condition at the boundary point $\varphi = \varphi_\alpha$ of the interval, respectively. Below the parametric angular basis functions $\phi_j^{\sigma=\pm 1}(\varphi; \rho)$ with the numbers $j = 1, \dots, n_0$ are referred to as cluster states with $\varepsilon_j(\rho) < 0$, and those with $j \geq n_0 + 1$ as pseudostates with $\varepsilon_j(\rho) > 0$, corresponding to the discrete and continuous spectrum of BVP for Eq. (6) at large values of the parameter ρ , respectively. To reveal the above structurization property, we introduce the linear

combinations of these functions $\phi_j^{\gamma,\beta}(\varphi; \rho)$ for the trimer and $\phi_j^{\leftarrow,\rightarrow}(\varphi; \rho)$ for the dimer:

$$\begin{aligned}\phi_j^{\gamma,\beta}(\varphi; \rho) &= (\pm\phi_j^{\sigma=-1}(\varphi; \rho) + \phi_j^{\sigma=1}(\varphi; \rho)) / \sqrt{2}, \\ \phi_j^{\leftarrow,\rightarrow}(\varphi; \rho) &= (\pm\phi_j^{\sigma=-1}(\varphi; \rho) + \phi_j^{\sigma=1}(\varphi; \rho)) / \sqrt{2}.\end{aligned}\quad (15)$$

The action of the parity operator \hat{I}_α on these functions

$$\begin{aligned}\hat{I}_\alpha\phi_j^\gamma(\varphi; \rho) &= \phi_j^\beta(\varphi; \rho), & \hat{I}_\alpha\phi_j^\beta(\varphi; \rho) &= \phi_j^\gamma(\varphi; \rho), \\ \hat{I}_\alpha\phi_j^{\leftarrow}(\varphi; \rho) &= \phi_j^{\rightarrow}(\varphi; \rho), & \hat{I}_\alpha\phi_j^{\rightarrow}(\varphi; \rho) &= \phi_j^{\leftarrow}(\varphi; \rho),\end{aligned}\quad (16)$$

consists in the permutation of states $|\gamma\rangle \leftrightarrow |\beta\rangle$ or $|\leftarrow\rangle \leftrightarrow |\rightarrow\rangle$ with respect to the lines $\varphi = (2s - 1)\varphi_\alpha$. Indeed, the parametric cluster functions at $j = 1, \dots, n_0$ and at large ρ have maximal in the vicinity of $\varphi = (2s - 2)\varphi_\alpha$ and $\varphi = 2s\varphi_\alpha$, respectively, that correspond to the eigenfunctions of cluster states of the BVP for Eq. (6). In the particular case of sector 1, the dimer functions $\phi_j^{\leftarrow,\rightarrow}(\varphi; \rho)$ have maximal in the vicinity of $\varphi = 0$ and $\varphi = \pi$, i.e. for $y > 0$, $v = \leftarrow$, or for $y < 0$, $v = \rightarrow$ at large ρ , respectively while the trimer functions $\phi_j^{\gamma,\beta}(\varphi; \rho)$ have maximal in the vicinity of $\varphi = 0$ and $\varphi = \pi/3$, i.e. for $x_{12}/y_{(12)3} > 0$, $v = \gamma$, or for $x_{31}/y_{(31)2} < 0$ $v = \beta$ at large ρ , respectively.

Using the above pairs of the basis functions (15), we rewrite the expansion (11) in the σ -representation

$$\Psi_{i_o}(\varphi, \rho) = \sum_{j=1}^N \sum_{\sigma} \phi_j^\sigma(\varphi; \rho) \chi_{j i_o}^\sigma(\rho), \quad (17)$$

where $\sigma = u, g$ or $\sigma = \gamma, \beta$ for the unknown functions $\chi_{j i_o}^\gamma(\rho)$ and $\chi_{j i_o}^\beta(\rho)$ in the $(\gamma\beta)$ -representation, related to the functions $\chi_{j i_o}^g(\rho)$ and $\chi_{j i_o}^u(\rho)$ in the (gu) -representation as

$$\chi_{j i_o}(\rho) = \begin{pmatrix} \chi_{j i_o}^\gamma(\rho) \\ \chi_{j i_o}^\beta(\rho) \end{pmatrix} = A \begin{pmatrix} \chi_{j i_o}^u(\rho) \\ \chi_{j i_o}^g(\rho) \end{pmatrix}, \quad A = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}. \quad (18)$$

The averaging of Eq. (8) with the basis functions in σ -representation (17) yields the system of coupled ODEs with determined by the hyperspherical parameterization of the two-dimensional configuration space

$$\left[-\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \rho \frac{d}{d\rho} + \frac{\varepsilon_i(\rho)}{\rho^2} - E \right] \chi_{i i_o}(\rho) + \sum_{j=1}^{j_{\max}} W_{ij}(\rho) \chi_{j i_o}(\rho) = 0, \quad (19)$$

$$W_{ij}(\rho) = H_{ji}(\rho) + \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \rho Q_{ji}(\rho) + Q_{ji}(\rho) \frac{d}{d\rho}. \quad (20)$$

Here the potential curves (terms) $\varepsilon_j(\rho)$ are eigenvalues of the BVP (12) and the effective potentials (EPs) $Q_{ij}(\rho) = -Q_{ji}(\rho)$, $H_{ij}(\rho) = H_{ji}(\rho)$ are expressed as integrals calculated in the reduced intervals $\varphi \in [0, 2\varphi_\alpha]$ using the above g, u symmetry:

$$Q_{ij}(\rho) = -\langle \phi_i | \partial_\rho \phi_j \rangle, \quad H_{ij}(\rho) = \langle \partial_\rho \phi_i | \partial_\rho \phi_j \rangle. \quad (21)$$

For *Task 3* the effective potentials $\hat{W}_{ij}(\rho) = W_{ij}(\rho) + V_{ij}^b(\rho)$ are sums of $W_{ij}(\rho)$, calculated using the potential curves and the parametric basis functions of *Task 1*, and

the matrix elements $V_{ij}^b(\rho)$ of the barrier potentials

$$V_{ij}^b(\rho) = \langle \phi_i | V^b(\rho | \sin(\varphi - \pi/4)) | \phi_j \rangle + V^b(\rho | \sin(\varphi + \pi/4)) | \phi_j \rangle. \quad (22)$$

As an example, we calculated with the required accuracy the parametric basis functions of BVP (12) and the effective potentials (21) for the models of Be₂ dimer and Be₃ trimer in collinear configuration using the FEM implemented in the program ODPEVP [10]. The results of calculation on the grid $\Omega_\varphi[1.8/\rho, \varphi_\alpha] = \{1.8/\rho(24)3/\rho(10)4/\rho(5)5/\rho(10)\varphi_\alpha\}$ for $\varphi_\alpha = \pi/2$ for Be₂ dimer and $\varphi_\alpha = \pi/6$ for Be₃ trimer. Using the obtained result in the uncoupled (gu)-representation and the transformation matrix A from Eq. (18), we can rewrite the system of ODEs in the coupled ($\alpha\beta$)-representation with the effective potentials.

$$U_{ij}(\rho) = \begin{pmatrix} U_{i\gamma j\gamma}(\rho) & U_{i\gamma j\beta}(\rho) \\ U_{i\beta j\gamma}(\rho) & U_{i\beta j\beta}(\rho) \end{pmatrix} = A \begin{pmatrix} U_{iuju}(\rho) & 0 \\ 0 & U_{igjg}(\rho) \end{pmatrix} A^{-1}. \quad (23)$$

In Section 4 one can see that the ($\gamma\beta$)-representation provides the required compatibility of the solutions of Eqs. (19) with the asymptotic boundary conditions of the scattering problem on the full axis and its half-axis.

4. Asymptotic Expressions of Scattering, Metastable and Bound States

The general solution F_j of the system of ODEs in the open channels $i_o = 1, \dots, N_o$ is determined by a linear combination of the fundamental solutions $\chi_{ji'_o}^-(p_{i_o}\rho)$ and $\chi_{ji'_o}^+(p_{i_o}\rho)$ calculated using Eqs. (19)–(21) following from [11] with the leading terms of the Hankel functions of the first and the second kind [17] $H_{1/2}^{(2)}(p_{i_o}\rho)$ and $H_{1/2}^{(1)}(p_{i_o}\rho)$ below the dissociation threshold at $E < 0$ in the form of incoming and outgoing waves

$$F_j^{as}(\rho) = \sum_{i'_o=1}^{N_o} \left[\chi_{ji'_o}^-(p_{i_o}\rho) a_{i'_o}^- + \chi_{ji'_o}^+(p_{i_o}\rho) a_{i'_o}^+ \right],$$

at $p_{i_o} = \sqrt{E - \varepsilon_{i_o}^\sigma} > 0$ in the open channels $N_o = \max_{E \geq \varepsilon_j} j \leq N$. The scattering matrix $S_{i_o i'_o}^\sigma(E)$ or $S_{i_o i'_o}^\sigma(p)$, where $p = \text{diag}\{p_{i_o}\}_{i_o=1}^{N_o}$, is a diagonal matrix. In open channels it is defined as the matrix transforming the amplitudes of the incoming waves $a_{i'_o}^-$ into those of the outgoing waves $a_{i'_o}^+$ [18]

$$a_{i'_o}^+ = \sum_{i'_o=1}^{N_o} S_{i'_o i_o}^\sigma(p) a_{i_o}^-. \quad (24)$$

The components of the radial asymptotic solutions $F_{ji'_o}^{as}(\rho)$ of the scattering problem in the open channels $i_o = 1, \dots, N_o$ have the form

$$F_{ji'_o}^{as}(\rho) = \sum_{i'_o=1}^{N_o} \left[\chi_{ji'_o}^-(p_{i_o}\rho) \delta_{ji'_o} + \chi_{ji'_o}^+(p_{i_o}\rho) S_{i'_o i_o}^\sigma(p) \right], \quad (25)$$

while in the closed channel $i_o = N_o + 1, \dots, N$ the asymptotic solutions $F_{ji_o}(\rho)$ are determined by the fundamental solutions $\chi_{ji_o}^+(ip_i\rho)$ with the leading term of Kelvin functions [17] $K_{1/2}(q_{i_o}\rho)$ for the decaying waves

$$F_{ji_o}^{as}(\rho) = a_{i_o}^+ \chi_{ji_o}^+(ip_{i_o}\rho). \quad (26)$$

These asymptotic solutions $\mathbf{F}(\rho) = \{\mathbf{F}_{i_o}(\rho)\}_{i_o=1}^N = \{\{F_{ji_o}(\rho)\}_{j=1}^N\}_{i_o=1}^N$ are used to have the conventional asymptotic boundary conditions for the components of the numerical solution $F_{ji_o}(\rho)$ of the system of ODEs (19) at large $\rho = \rho_{\max}$

$$F_{ji_o}(\rho) = F_{ji_o}^{as}(\rho), \quad \frac{d}{d\rho} F_{ji_o}(\rho) = \frac{d}{d\rho} F_{ji_o}^{as}(\rho). \quad (27)$$

The scattering problem (3)–(6) with the asymptotic boundary conditions (25) and (26) is reduced to a boundary-value problem for the set of close-coupled equations (19) with the boundary conditions at $\rho = \rho_{\min}$ and $\rho = \rho_{\max}$:

$$\mathbf{F}(\rho_{\min}) = 0, \quad \left. \frac{d\mathbf{F}(\rho)}{d\rho} \right|_{\rho=\rho_{\max}} = \mathcal{R}(\rho_{\max})\mathbf{F}(\rho_{\max}), \quad (28)$$

where $\mathcal{R}(\rho_{\max})$ is a $N \times N$ symmetric matrix function of E , $\mathbf{F}(\rho) = \{\chi_{i_o}(\rho)\}_{i_o=1}^N = \{\{\chi_{ji_o}(\rho)\}_{j=1}^N\}_{i_o=1}^N$ is the required $N \times N$ numerical matrix solution.

These matrices and the $N_o \times N_o$ matrices $\mathbf{S}_{\pm 1} = \{S_{i_o i_o}^{g,u}(E)\}_{i_o=1}^{N_o}$ sought for in the open channels $N_o = \max_{E \geq \varepsilon_j} j \leq N$ are calculated directly from (27) using the program KANTBP 4M [8].

For metastable states the even and odd eigenfunctions obey the boundary conditions of the third kind (28), where the matrices $\mathcal{R}(\rho_{\max}) = \text{diag}(\mathcal{R}(\rho_{\max}))$ depend on the complex energy eigenvalue $E \equiv E_m = \text{Re } E_m + i \text{Im } E_m$, $\text{Im } E_m < 0$ sought for, and are expressed as [19]

$$\mathcal{R}_{i_o i_o}(\rho_{\max}) = \left\{ \begin{array}{ll} ip_m, & \text{Re } E_m \geq \varepsilon_j^\sigma \\ iq_m, & \text{Re } E_m < \varepsilon_j^\sigma \end{array} \right\}, \quad p_m = \sqrt{E_m - \varepsilon_{i_o}^\sigma}, \quad q_m = i\sqrt{\varepsilon_{i_o}^\sigma - E_m}, \quad (29)$$

since the asymptotic solutions of this problem contain only outgoing waves in the open channels $i_o = 1, \dots, N_o$ and closed ones $i_o = N_o + 1, \dots, N$. In this case the eigenfunctions obey the orthogonality and normalization conditions

$$(\mathbf{F}_m | \mathbf{F}_{m'}) = (ip_m + ip_{m'}) \left[\int_{\rho_{\min}}^{\rho_{\max}} \mathbf{F}_m^T(\rho) \mathbf{F}_{m'}(\rho) d\rho - \delta_{mm'} \right] + C_{mm'} = 0, \quad (30)$$

$$C_{mm'} = -\mathbf{F}_m^T(\rho_{\max}) \mathbf{F}_{m'}(\rho_{\max}).$$

For bound states the even (g) and odd (u) eigenfunctions obey the boundary conditions (28), with the matrices $\mathcal{R}(\rho_{\max}) = \text{diag}(\mathcal{R}(\rho_{\max})) = 0$. In this case the eigenfunctions obey the orthogonality and normalization conditions

$$\langle \mathbf{F}_m | \mathbf{F}_{m'} \rangle = \int_{\rho_{\min}}^{\rho_{\max}} \mathbf{F}_m^T(\rho) \mathbf{F}_{m'}(\rho) d\rho = \delta_{mm'}. \quad (31)$$

Taking the property (15) and (16) of the quasiangular parametric basis functions and the effective potentials (23) into account, we express the S-matrix in the $(\gamma\beta)$ representation on the full axis \mathcal{R}^1 via the matrix S^σ (24), (25) calculated on the half-axis \mathcal{R}_+^1 . The matrix \mathbf{S} is a unitary and symmetric scattering matrix

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} \mathbf{S}_{\gamma\gamma} & \mathbf{S}_{\gamma\beta} \\ \mathbf{S}_{\beta\gamma} & \mathbf{S}_{\beta\beta} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{S}^\dagger \mathbf{S} = \mathbf{S} \mathbf{S}^\dagger = \mathbf{I}, \quad (32)$$

consisting of the matrices $\mathbf{S}_{\gamma\gamma}$, $\mathbf{S}_{\beta\beta}$ and $\mathbf{S}_{\gamma\beta} = \mathbf{S}_{\gamma\beta}^T$ of the dimension $N_o \times N_o$ determined by the relations $\mathbf{S}_{\gamma\gamma} = \mathbf{S}_{\beta\beta} = (\mathbf{S}_{+1} + \mathbf{S}_{-1})/2$, $\mathbf{S}_{\gamma\beta} = \mathbf{S}_{\beta\gamma}^T = (\mathbf{S}_{+1} - \mathbf{S}_{-1})/2$, where $\mathbf{S}_{+1} \equiv \mathbf{S}_g$ and $\mathbf{S}_{-1} \equiv \mathbf{S}_u$ are the matrices from (25). Here \mathbf{I} is the unit matrix with the dimension $2N_o \times 2N_o$, $\mathbf{S}_{\gamma\gamma}$ and $\mathbf{S}_{\beta\beta}$ corresponds to the elastic scattering processes (in the considered case of 1D scattering it means reflection) of the dimer $(\alpha\beta)$ (or $(\gamma\alpha)$) on the atom γ (or β): $\gamma + (\alpha\beta) \rightarrow \gamma + (\alpha\beta)$, or $(\gamma\alpha) + \beta \rightarrow (\gamma\alpha) + \beta$, and $\mathbf{S}_{\beta\gamma}$ and the matrices $\mathbf{S}_{\gamma\beta}$ correspond to the inelastic rearrangement scattering processes (in the case of 1D scattering it means transmission) $\gamma + (\alpha\beta) \rightarrow (\gamma\alpha) + \beta$ or $(\gamma\alpha) + \beta \rightarrow \gamma + (\alpha\beta)$, for which the conventional relations between inelastic and elastic scattering below breakup threshold at $E < 0$ follow from (32) that provide conservation of the Wronskian, $|\mathbf{S}_{\beta\gamma}|^2 = \mathbf{I} - |\mathbf{S}_{\gamma\gamma}|^2$ and $\mathbf{S}_{\beta\gamma} = \mathbf{S}_{\gamma\beta}^T$, where \mathbf{I} is the unit $N_o \times N_o$ matrix.

For the scattering of the dimer $(\gamma\beta)$ by the potential barriers, considered on the full axis, the matrix \mathbf{S} is the $2N_o \times 2N_o$ scattering matrix (32) read as similar to [19]

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} \mathbf{R}_{\leftarrow} & \mathbf{T}_{\rightarrow} \\ \mathbf{T}_{\leftarrow} & \mathbf{R}_{\rightarrow} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{S}^\dagger \mathbf{S} = \mathbf{S} \mathbf{S}^\dagger = \mathbf{I}, \quad (33)$$

where \mathbf{I} is the unit matrix with the dimension $2N_o \times 2N_o$ consisting of the amplitudes of the reflected and transmitted waves $\mathbf{R}_v = \mathbf{R}_v(E)$ and $\mathbf{T}_v = \mathbf{T}_v(E)$, where $v = \leftarrow, \rightarrow$ indicates the direction of the incident wave propagation with respect to the y -axis, i.e., $v = \leftarrow$ and $v = \rightarrow$ for $y > 0$ and $y < 0$, respectively, and the $N_o \times N_o$ matrices $\mathbf{R}_v = \mathbf{R}_v(E)$ and $\mathbf{T}_v = \mathbf{T}_v(E)$ are expressed as $\mathbf{R}_{\leftarrow} = \mathbf{R}_{\rightarrow} = (\mathbf{S}_{+1} + \mathbf{S}_{-1})/2$, $\mathbf{T}_{\leftarrow} = \mathbf{T}_{\rightarrow} = (\mathbf{S}_{+1} - \mathbf{S}_{-1})/2$.

For the scattering of the dimer $(\alpha\beta)$ on potential barriers similar relations determine the reflection $\mathbf{R}_{\leftarrow} = \mathbf{S}_{\gamma\gamma}$ and $\mathbf{R}_{\rightarrow} = \mathbf{S}_{\beta\beta}$, and transmission $\mathbf{T}_{\leftarrow} = \mathbf{S}_{\beta\gamma}$ and $\mathbf{T}_{\rightarrow} = \mathbf{S}_{\gamma\beta}$ amplitudes. For the reflection coefficient $|\mathbf{R}_v|^2 = \mathbf{R}_v^\dagger \mathbf{R}_v$ and the transmission coefficient $|\mathbf{T}_v|^2 = \mathbf{T}_v^\dagger \mathbf{T}_v$ the conventional relation below breakup threshold at $E < 0$ following from (32) and constant Wronskian, $|\mathbf{T}_v|^2 = \mathbf{I} - |\mathbf{R}_v|^2$ is valid, where \mathbf{I} is the unit $N_o \times N_o$ matrix.

5. Bound, Metastable and Scattering States of the trimer

For the considered models, the eigenvalues and the hyperradial components of 2D eigenfunctions of the BVP for the set of ODEs (19) with Dirichlet boundary conditions were calculated with the predetermined accuracy using the FEM implemented in the KANTBP 4M program [8].

The set of even (g) and odd (u) bound states of the trimer Be_3 (*Task 2*) were calculated on the grid $\Omega_h = \{\rho_{\min} = 4.24(1)4.33(10)6.13(1)6.33(23)\rho_{\max} = 11.39\}$, where in parentheses the number of fifth-order Hermitian elements [20] is indicated, for the number of equations $N = 15$ in the system (19).

The comparison of sets of total and binding energies of g and u bound states of the trimer Be_3 calculated by KM and 2D FEM is presented in Table 1 and the corresponding eigenfunctions (11) are shown in Fig. 2. One can see that results obtained by KM and 2D FEM [3, 7] are in agreement with an accuracy of the order 0.1\AA^{-2} .

Table 1
The total $E_i(*)$ and binding energies $-E_i^b(*)=E_i(*)-E^{\text{trsh}}$ of g and u bound states of the trimer Be_3 relative to the exact threshold $E^{\text{trsh}}=-193.06$ (in \AA^{-2}): $E_i(K)$ and $-E_i^b(K)$ calculated by KM in polar coordinates using $N=12$ basis functions (g or u); $E_i(F)$ and $-E_i^b(F)$ calculated by the 2D FEM using fifth order interpolation Lagrange polynomials on triangular finite elements in sector 1 of Jacobi coordinates

i	1g	2g	3u	4g	5u	6g
$-E_i(K)$	389.08	335.43	300.58	287.02	260.47	245.84
$-E_i^b(K)$	196.02	142.37	107.52	93.96	67.41	52.78
$-E_i(F)$	389.09	335.45	300.60	287.05	260.50	245.88
$-E_i^b(F)$	196.03	142.39	107.54	93.99	67.44	52.82
i	7u	8g	9u	10g	11u	12g
$-E_i(K)$	227.66	225.39	215.37	204.85	198.21	193.86
$-E_i^b(K)$	34.60	32.33	22.31	11.79	5.15	0.80
$-E_i(F)$	227.70	225.42	215.41	204.89	198.24	193.91
$-E_i^b(F)$	34.64	32.36	22.35	11.83	5.18	0.85

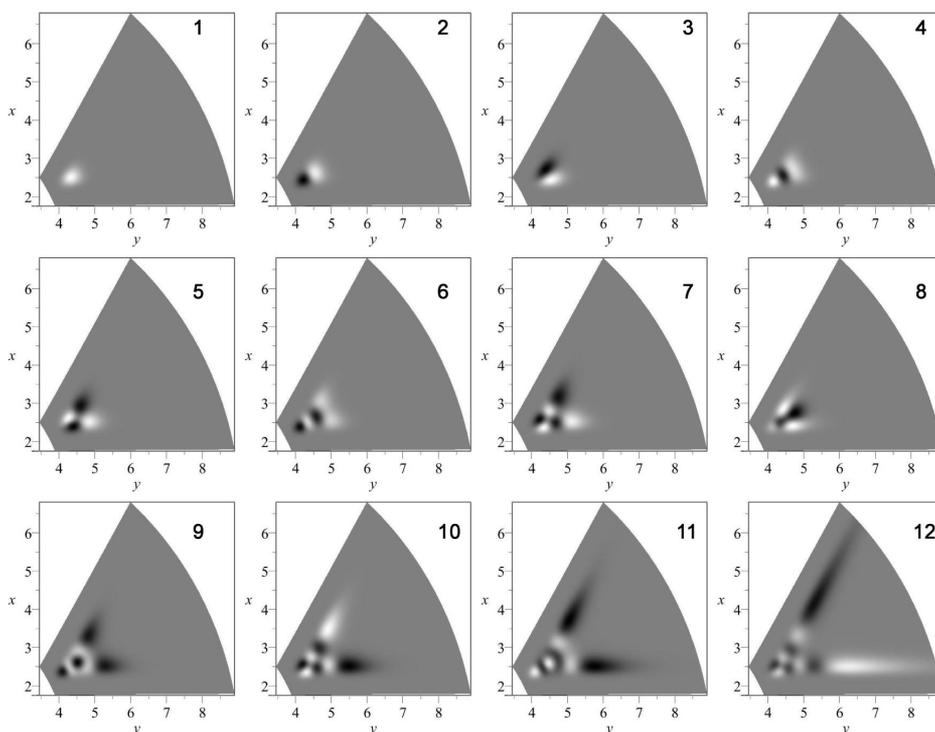


Figure 2. The density plots of the eigenfunctions $\Psi_\nu^{g,u}(\varphi, \rho)$ displayed in sector 1 of (y, x) -plane (in \AA) of the gerade (g) and ungerade (u) bound states with energies $E_\nu^{g,u}$ of the Be_3 trimer presented in Table 1. The negative, positive and near-zero values of the eigenfunctions are displayed by black, white and gray, respectively

These solutions, i.e. the real eigenvalues and the corresponding eigenfunctions, were used as an initial approximation in the continuous analogue of Newton's method [21] with additional condition $(\mathbf{F}_m | \mathbf{F}_{m'}) = 0$ to calculate the metastable states of the trimer Be_3 on the same finite-element grid. The corresponding problem of the dimer scattering on an atom was solved on the same grid and $N = 15$.

The calculated complex energies of the metastable states $E_m^M \equiv E_m = \text{Re } E_m + i \text{Im } E_m$ for the trimer are presented in Table 2.

Table 2

The sets of the first resonance energy values E at which the minimum of the transmission coefficient $|S_{ab}|_{ii}^2$ is achieved, the number i of the threshold ε_i , the real and imaginary part of the complex energy eigenvalues $E_\nu = \text{Re } E_\nu^M + i \text{Im } E_\nu^M$ in \AA^{-2} of the even g and odd u metastable states of Be_3 numbered by the index ν calculated with $N = 15$ equations (19)

E	i	$ S_{ab} _{ii}^2$	$\text{Re } E_\nu^M$	$\text{Im } E_\nu^M$	ν type
-193.066	1				thr
-189.676	1	$1 \cdot 10^{-7}$	-188.94	$-4 \cdot 10^{-2}$	1g
-164.654	1	$4 \cdot 10^{-6}$	-164.72	$-1 \cdot 10^{-2}$	1u
-156.882	1	$3 \cdot 10^{-6}$	-157.04	$-2 \cdot 10^{-2}$	2g
-140.545	1	$1 \cdot 10^{-4}$	-140.57	$-5 \cdot 10^{-3}$	2u
-132.485	1	$1 \cdot 10^{-6}$	-132.47	$-4 \cdot 10^{-3}$	3g
-124.256	1	$1 \cdot 10^{-3}$	-124.16	$-6 \cdot 10^{-3}$	3u
-120.638	1	$1 \cdot 10^{-6}$	-120.75	$-8 \cdot 10^{-2}$	4g
-119.392	2				thr
-113.248	2	0.10	-113.24	$-2 \cdot 10^{-2}$	5g
-89.319	2	$9 \cdot 10^{-4}$	-89.16	$-3 \cdot 10^{-2}$	6g
-77.271	2	0.77	-76.51	$-4 \cdot 10^{-6}$	4u
-70.309	2	0.35	-70.30	$-2 \cdot 10^{-3}$	7g
-63.385	2	0.41	-65.14	$-3 \cdot 10^{-4}$	5u
-63.338	3				thr
-42.858	3	0.06	-42.87	$-6 \cdot 10^{-3}$	8g
-29.396	3	0.13	-29.19	$-4 \cdot 10^{-2}$	9g
-24.899	3	0.19	-25.82	$-1 \cdot 10^{-3}$	6u
-24.904	4				thr
-6.799	4	0.40	-7.12	$-1 \cdot 10^{-3}$	10g
-4.089	5				thr
0					thr

These metastable states are responsible for resonance energies, corresponding to the minimal probability of inelastic scattering of the dimer by the atom, i.e., to the resonance quantum reflection from the potential well (Feshbach resonances, see Figs. 1 (a) and 3 (a)).

As an example, in Fig. 4 we display the eigenfunctions of the scattering problem for gerade and ungerade states corresponding to the minimum of the transmission coefficient $|S_{\gamma\beta}|^2 = |S_{\beta\gamma}|^2 = \cdot 10^{-7}$ at $E = -189.676$, as well as the metastable state 1g from Table 2.

The isolines of the absolute values $|\Psi^{\gamma,\beta}(y, x)|$ of the linear combinations $\Psi^{\gamma,\beta}(y, x) = (\Psi^g(y, x) \pm \Psi^u(y, x))/\sqrt{2}$ demonstrates the effect of resonance reflection from the effective

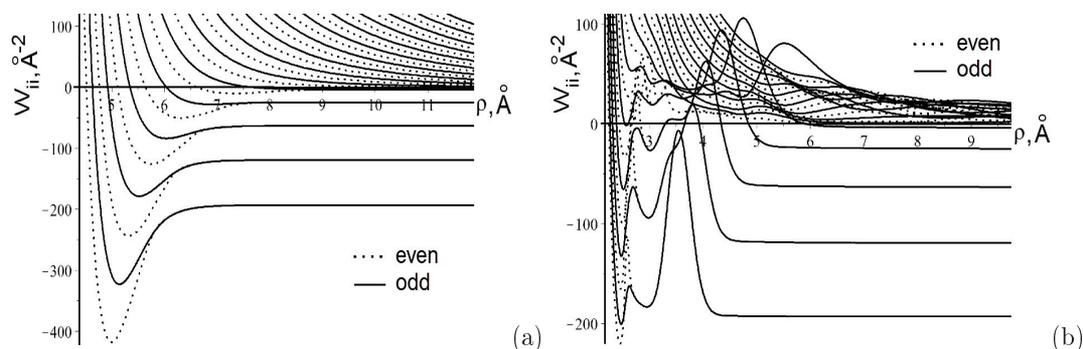


Figure 3. The effective diagonal potentials $W_{jj}(\rho) = \varepsilon_j(\rho)\rho^{-2} + H_{jj}(\rho)$ for the Be_3 trimer (a) and effective diagonal potentials $W_{jj}(\rho) = \varepsilon_j(\rho)\rho^{-2} + H_{jj}(\rho) + V_{jj}^b(\rho)$ for the tunneling problem of the dimer Be_2 through the Gaussian barrier (b)

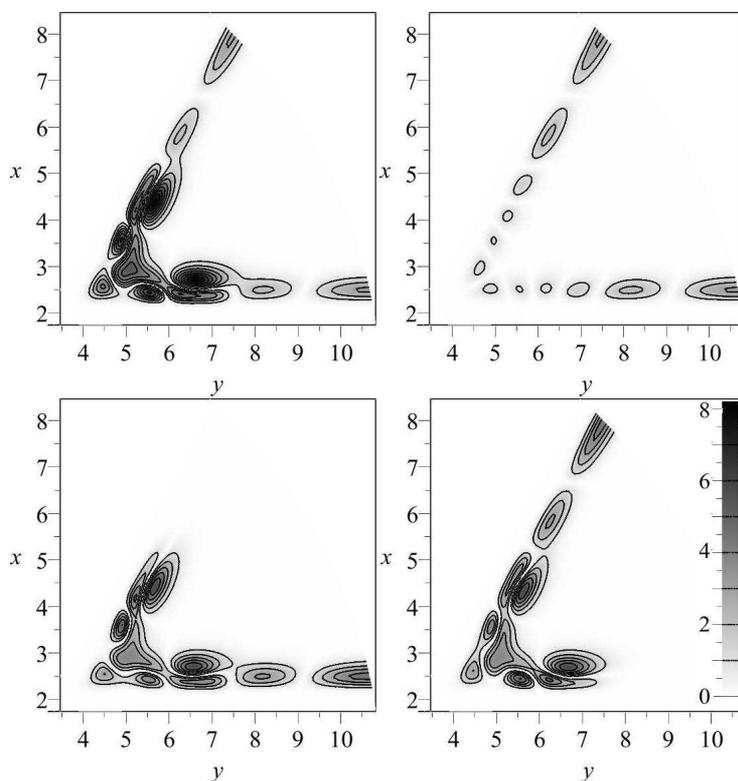


Figure 4. Upper panel: the isolines of the absolute values $|\Psi^{g,u}(\varphi, \rho)|$ of corresponding gerade (left-hand panel) and ungerade (right-hand panel) solutions in sector 1 of (y, x) -plane (in \AA) for the scattering of Be atom with the energy $-E = 189.676 \text{ \AA}^{-2}$ (relative to the three-body threshold) on the dimer Be_2 , corresponding to the 1g metastable state from Table 2. Lower panel: isolines of the absolute values $|\Psi^{\gamma,\beta}(\varphi, \rho)|$ of the linear combinations

$$\Psi^{\gamma,\beta}(\varphi, \rho) = (\pm\Psi^u(\varphi, \rho) + \Psi^g(\varphi, \rho))/\sqrt{2}$$

potential well. It can be seen from the figures that the shape of the wave functions of the gerade scattering states (Fig. 4 (a)) and metastable states (Fig. 5) are similar and they are localized in the vicinity of the potential well (Fig. 3 (a)). At the same time, for the same energy value $E = -189.6 \text{ \AA}^{-2}$, the wave function of ungerade scattering states (Fig. 4 b) is a typical nonresonant wave function.

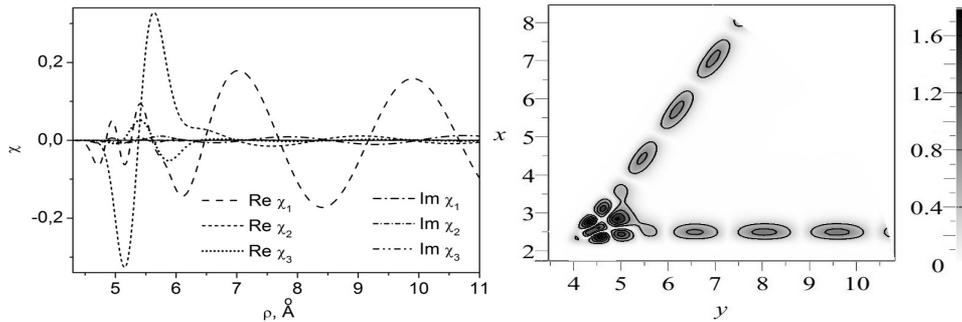


Figure 5. The components χ_j and isolines of the absolute values $|\Psi(\varphi, \rho)|$ of the solution $\Psi(\varphi, \rho)$ for the trimer Be_3 in 1g metastable state with the real part of energy eigenvalues $\text{Re } E = -188.94 \text{ \AA}^{-2}$, localized near the minimal of the trimer potential

6. Metastable and Scattering States of the Dimer Tunneling

The metastable states of the dimer Be_2 tunneling through Gaussian barriers of *Task 3* were calculated for BVP calculated with $N = 15$ equations in the system (19) with matrix elements of potential barrier on the finite element grid $\Omega_\rho = \{\rho_{\min} = 1.81(12)4.21(15)\rho_{\max} = 7.51\}$ with the fifth-order Hermitian elements ($p = 5$). The corresponding problem of a dimer tunneling through the barriers was solved on the same grid.

The corresponding algebraic eigenvalue problem for metastable states was solved using the above mentioned continuous analogue of Newton's method. As the initial approximation the real eigenvalues and the corresponding orthonormalized eigenfunctions (31) were used. They were found as a result of solving the bound state problem with $\mathcal{R}(y^t) = 0$ on the grid $\Omega_\rho = \{\rho_{\min} = 1.81(12)\rho_{\max} = 4.21\}$. The complex values of energy of the metastable states $E_m^M \equiv E_m = \text{Re } E_m + i \text{Im } E_m$ for the dimer Be_2 tunneling through the Gaussian barriers, are presented in Fig. 6.

These metastable states are responsible for the resonance values of energy, corresponding to the maximal transmission coefficient, i.e., the quantum transparency of the potential barriers (see Figs. 1 (b) and 3 (b)), i.e., the shape resonances. The position of peaks presented in Fig. 6. is seen to be in quantitative agreement with the real part $\text{Re}(E)$, and the geometric halfwidth of the $|T|_{11}^2(E)$ peaks agrees by the order of magnitude with the imaginary part $\Gamma = -2 \text{Im}(E)$ of the complex energy eigenvalues $E = \text{Re}(E) + i \text{Im}(E)$ of the metastable states. The obtained complex energy values corresponding to the resonance values of energy in the first open channel are in good agreement with the ones calculated analytically in the model of a rigid diatomic molecule with Morse potential tunneling through the Gaussian barrier at the same values of parameters [13]. From Fig. 6 one can see that as the energy of the initial excited state increases, the transmission peaks demonstrate a shift towards higher energies, the set of peak positions keeping approximately the same as for the transitions from the ground state and the peaks just replace each other. For example, the left epure shows that the positions of the 13th and 14th peaks for transitions from the first state coincide with the positions of the 1st and

2nd peaks for the transitions from the second state, while the right epure shows that the positions of the 25th and 26th peaks for transitions from the first state coincide with the positions of the 13th and 14th peaks for transitions from the second state and with the positions of the 1st and 2nd peaks for the transitions from the third state.

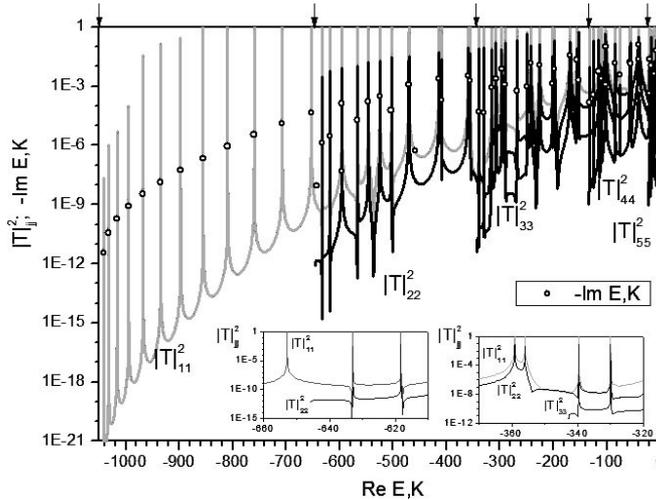


Figure 6. The total probability $|T_{ii}^2(E) = \sum_{j=1}^{N_o} T_{ij}^* T_{ji}|$ (lines) of penetration of the dimer for the initial states i through the repulsive Gaussian potential barriers versus the total energy $E = \text{Re } E$ counted from the main threshold $E = 0$. The values of the threshold energies $E = \varepsilon_i$, $i = 1, \dots, 5$ corresponding to the energies of ground and excited initial states are shown by arrows. The real $\text{Re } E$ and imaginary $(-1) \text{Im } E$ part (with negative sign) of the metastable states energy (circles)

7. Conclusion

The model for three atomic beryllium system in a straight line was formulated as a 2D boundary-value problem for the Schrödinger equation in Jacobi and polar coordinates. Using the Kantorovich expansions this problem has been reduced to the boundary-value problem for a set of second-order ordinary differential equations.

The efficiency of the elaborated method, algorithms and programs has been demonstrated by benchmark calculations of the resonance scattering, metastable and bound states of the considered models and also by a comparison of results for bound states of the three atomic system in the framework of direct solving BVP by FEM and Kantorovich reduction.

The effects of resonant quantum transmission of diatomic molecule through the potential barrier and reflection from the effective potential well of a three atomic system (see Figs. 3 (b) and 3 (a)), arising in the scattering process were revealed, that are generated by metastable states of the composite system (cluster + barrier or well) with complex energy eigenvalues below the dissociation threshold of dimer, corresponding to the shape and Feshbach resonances, respectively.

The elaborated method, algorithms and programs [8–10] for solving the three-atomic scattering problem as well as diatomic molecule tunneling through potential barrier can be applied to the further analysis of quantum transparency and reflection effects [13], quantum diffusion [22] and the resonance scattering in triatomic systems using modern theoretical and experimental results [23, 24].

References

1. P. Ciarlet, *The Finite Element Method for Elliptic Problems*, North-holland Publ. Comp, Amsterdam, 1978. doi:10.1137/1.9780898719208.
2. V. G. Korneev, *Schemes of the Finite Element Method for High Orders of Accuracy*, Leningrad State University, Leningrad, 1977, in Russian.
3. A. A. Gusev, V. P. Gerdt, O. Chuluunbaatar, G. Chuluunbaatar, S. I. Vinitzky, V. L. Derbov, A. Gózdź, Symbolic-Numerical Algorithm for Generating Interpolation Multivariate Hermite Polynomials of High-Accuracy Finite Element Method, *Lecture Notes in Computer Science* 10490 (2017) 134–150. doi:10.1007/978-3-319-66320-3_11.
4. A. A. Gusev, S. I. Vinitzky, O. Chuluunbaatar, G. Chuluunbaatar, V. P. Gerdt, V. L. Derbov, A. Gózdź, P. M. Krassovitskiy, High-Accuracy Finite Element Method: Benchmark Calculations, *European Physics Journal – Web of Conferences* 173 (2018) 03009.
5. A. A. Gusev, S. I. Vinitzky, O. Chuluunbaatar, G. Chuluunbaatar, V. P. Gerdt, V. L. Derbov, A. Gózdź, P. M. Krassovitskiy, Interpolation Hermite Polynomials For Finite Element Method, *European Physics Journal – Web of Conferences* 173 (2018) 03010.
6. A. A. Gusev, S. I. Vinitzky, O. Chuluunbaatar, G. Chuluunbaatar, V. P. Gerdt, V. L. Derbov, A. Gózdź, P. M. Krassovitskiy, Algorithm for calculating interpolation hermite polynomials for high-accuracy finite element method, in: *Computer Algebra: International Conference Materials*, Plekhanov Russian University of Economics, 2017, pp. 89–95.
7. A. A. Gusev, V. P. Gerdt, O. Chuluunbaatar, G. Chuluunbaatar, S. I. Vinitzky, V. L. Derbov, A. Gózdź, Symbolic-Numerical Algorithms for Solving the Parametric Self-Adjoint 2D Elliptic Boundary-Value Problem Using High-Accuracy Finite Element Method, *Lecture Notes in Computer Science* 10490 (2017) 151–166. doi:10.1007/978-3-319-66320-3_12.
8. A. A. Gusev, L. L. Hai, O. Chuluunbaatar, S. I. Vinitzky, Program KANTBP 4M for Solving Boundary-Value Problems for Systems of Ordinary Differential Equations of the Second Order.
URL <http://wwwinfo.jinr.ru/programs/jinrlib/kantbp4m>
9. A. A. Gusev, O. Chuluunbaatar, S. I. Vinitzky, A. G. Abrashkevich, KANTBP 3.0: New version of a Program for Computing Energy Levels, Reflection and Transmission Matrices, and Corresponding Wave Functions in the Coupled-Channel Adiabatic Approach, *Computer Physics Communications* 185 (2014) 3341–3343. doi:10.1016/j.cpc.2014.08.002.
10. O. Chuluunbaatar, A. A. Gusev, S. I. Vinitzky, A. G. Abrashkevich, ODPEVP: A Program for Computing Eigenvalues and Eigenfunctions and Their First Derivatives with Respect to the Parameter of the Parametric Self-Adjoined Sturm–Liouville Problem, *Computer Physics Communications* 180 (2009) 1358–1375. doi:10.1016/j.cpc.2009.04.017.
11. A. A. Gusev, O. Chuluunbaatar, S. I. Vinitzky, V. L. Derbov, Algorithms for Solving the Boundary-Value Problems for Atomic Trimers in Collinear Configuration using the Kantorovich Method, *Bulletin of Peoples' Friendship University of Russia. Series: Mathematics. Information Sciences. Physics* (4) (2016) 56–76.
12. J. F. Cornwell, *Group Theory in Physics*, Academic Press, New York, 1984.
13. P. M. Krassovitskiy, F. M. Pen'kov, Contribution of Resonance Tunneling of Molecule to Physical Observables, *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* 47 (22) (2014) 225210. doi:10.1088/0953-4075/47/22/225210.
14. J. Wang, G. Wang, J. Zhao, Density Functional Study of Beryllium Clusters, with Gradient Correction, *Journal of Physics: Condensed Matter* 13 (33) (2001) L753–L758. doi:10.1088/0953-8984/13/33/101.
15. L. J. Lauhon, W. Ho, Direct Observation of the Quantum Tunneling of Single Hydrogen Atoms with a Scanning Tunneling Microscope, *Physical Review Letters* 85 (2000) 4566–4569. doi:10.1103/PhysRevLett.85.4566.

16. L. V. Kantorovich, V. I. Krylov, Approximate Methods of Higher Analysis, Wiley, New York, 1964.
17. M. Abramovits, I. A. Stegun, Handbook of Mathematical Functions, Dover, New York, 1972.
18. R. G. Newton, Analytic Properties of Radial Wave Functions, Journal of Mathematical Physics 1 (1960) 319–348. doi:10.1063/1.1703680.
19. A. A. Gusev, S. I. Vinitzky, O. Chuluunbaatar, V. L. Derbov, A. Gózdź, P. M. Krassovitskiy, Metastable States of a Composite System Tunneling through Repulsive Barriers, Theoretical and Mathematical Physics 186 (2016) 21–40. doi:10.1134/S0040577916010037.
20. A. A. Gusev, O. Chuluunbaatar, S. I. Vinitzky, V. L. Derbov, A. Gózdź, L. L. Hai, V. A. Rostovtsev, Symbolic-Numerical Solution of Boundary-Value Problems with Self-Adjoint Second-Order Differential Equation using the Finite Element Method with Interpolation Hermite Polynomials, Lecture Notes in Computer Science 8660 (2014) 138–154. doi:10.1007/978-3-319-10515-4_11.
21. I. V. Puzynin, T. L. Boyadjiev, S. I. Vinitzky, E. V. Zemlyanaya, T. P. Puzynina, O. Chuluunbaatar, Methods of Computational Physics for Investigation of Models of Complex Physical Systems, Physics of Particles and Nuclei 38 (2007) 70–116. doi:10.1134/S1063779607010030.
22. E. Pijper, A. Fasolino, Quantum Surface Diffusion of Vibrationally Excited Molecular Dimers, Journal of Chemical Physics 126 (2007) 014708. doi:10.1063/1.2424699.
23. A. V. Mitin, Unusual Chemical Bonding in the Beryllium Dimer and its Twelve Vibrational Levels, Chemical Physics Letters 682 (2017) 30–33. doi:10.1016/j.cplett.2017.05.071.
24. J. M. Merritt, V. E. Bondybey, M. C. Heaven, Beryllium Dimer–Caught in the Act of Bonding, Science 324 (2009) 1548–1551. doi:10.1126/science.1174326.

УДК 519.632.4

DOI: 10.22363/2312-9735-2018-26-3-226-243

Метод конечных элементов высокого порядка точности для решения двухмерных эллиптических краевых задач двух и трёх тождественных атомов на прямой

А. А. Гусев

*Лаборатория информационных технологий
Объединённый институт ядерных исследований
ул. Жолио-Кюри, д. 6, г. Дубна, Московской обл., 141980, Россия*

Рассмотрены модели трёх одинаковых атомов на прямой с парным молекулярным взаимодействием и рассеяние двухатомной молекулы на атоме или её туннелирование через потенциальные барьеры. Модели сформулированы в виде двумерных эллиптических краевых задач (КЗ) в координатах Якоби и полярных координатах. КЗ в координатах Якоби решаются методом конечных элементов высокого порядка точности для дискретного спектра рассматриваемых моделей. Для решения задач рассеяния КЗ в полярных координатах с помощью метода Канторовича сводится к системе обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка по радиальной переменной с использованием разложения искомого решения по набору угловых базисных функций, параметрически зависящих от радиальной переменной. Эффективность разработанного метода, алгоритмов и программ демонстрируется путём эталонных расчётов резонансного рассеяния, метастабильных и связанных состояний рассматриваемых моделей, а также путём сравнения результатов для связанных состояний трёх атомных систем в рамках прямого решения КЗ методом конечных элементов и редукции Канторовича.

Ключевые слова: эллиптические краевые задачи, задача рассеяния, метастабильные и связанные состояния, метода Канторовича

Литература

1. *Ciarlet P.* The Finite Element Method for Elliptic Problems. — Amsterdam: North-holland Publ. Comp, 1978. — DOI: 10.1137/1.9780898719208.
2. *Корнеев В. Г.* Схемы метода конечных элементов высоких порядков точности. — Ленинград: Издательство Ленинградского университета, 1977.
3. Symbolic-Numerical Algorithm for Generating Interpolation Multivariate Hermite Polynomials of High-Accuracy Finite Element Method / A. A. Gusev, V. P. Gerdt, O. Chuluunbaatar et al. // Lecture Notes in Computer Science. — 2017. — Vol. 10490. — Pp. 134–150. — DOI: 10.1007/978-3-319-66320-3_11.
4. High-Accuracy Finite Element Method: Benchmark Calculations / A. A. Gusev, S. I. Vinitsky, O. Chuluunbaatar et al. // European Physics Journal – Web of Conferences. — 2018. — Vol. 173. — P. 03009.
5. Interpolation Hermite Polynomials For Finite Element Method / A. A. Gusev, S. I. Vinitsky, O. Chuluunbaatar et al. // European Physics Journal – Web of Conferences. — 2018. — Vol. 173. — P. 03010.
6. Algorithm for Calculating Interpolation Hermite Polynomials for High-Accuracy Finite Element Method / A. A. Gusev, S. I. Vinitsky, O. Chuluunbaatar et al. // Computer Algebra: International Conference Materials / Plekhanov Russian University of Economics. — 2017. — Pp. 89–95.
7. Symbolic-Numerical Algorithms for Solving the Parametric Self-Adjoint 2D Elliptic Boundary-Value Problem Using High-Accuracy Finite Element Method / A. A. Gusev, V. P. Gerdt, O. Chuluunbaatar et al. // Lecture Notes in Computer Science. — 2017. — Vol. 10490. — Pp. 151–166. — DOI: 10.1007/978-3-319-66320-3_12.
8. *Gusev A. A., Hai L. L., Chuluunbaatar O., Vinitsky S. I.* Program KANTBP 4M for Solving Boundary-Value Problems for Systems of Ordinary Differential Equations of the Second Order. — <http://wwwinfo.jinr.ru/programs/jinrlib/kantbp4m>.
9. KANTBP 3.0: New version of a Program for Computing Energy Levels, Reflection and Transmission Matrices, and Corresponding Wave Functions in the Coupled-Channel Adiabatic Approach / A. A. Gusev, O. Chuluunbaatar, S. I. Vinitsky, A. G. Abrashkevich // Computer Physics Communications. — 2014. — Vol. 185, issue 12. — Pp. 3341–3343. — DOI: 10.1016/j.cpc.2014.08.002.
10. ODPEVP: A Program for Computing Eigenvalues and Eigenfunctions and Their First Derivatives with Respect to the Parameter of the Parametric Self-Adjoined Sturm–Liouville Problem / O. Chuluunbaatar, A. A. Gusev, S. I. Vinitsky, A. G. Abrashkevich // Computer Physics Communications. — 2009. — Vol. 180, issue 8. — Pp. 1358–1375. — DOI: 10.1016/j.cpc.2009.04.017.
11. Алгоритмы решения краевых задач для атомных тримеров в коллинеарной конфигурации методом Канторовича / А. А. Гусев, О. Чулуунбаатар, С. И. Виницкий, В. Л. Дербов // Вестник РУДН: Серия Математика. Информатика. Физика. — 2016. — № 4. — С. 56–76.
12. *Cornwell J. F.* Group Theory in Physics. — New York: Academic Press, 1984.
13. *Krassovitskiy P. M., Pen'kov F. M.* Contribution of Resonance Tunneling of Molecule to Physical Observables // Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics. — 2014. — Vol. 47, No 22. — P. 225210. — DOI: 10.1088/0953-4075/47/22/225210.
14. *Wang J., Wang G., Zhao J.* Density Functional Study of Beryllium Clusters, with Gradient Correction // Journal of Physics: Condensed Matter. — 2001. — Vol. 13, No 33. — Pp. L753–L758. — DOI: 10.1088/0953-8984/13/33/101.
15. *Lauhon L. J., Ho W.* Direct Observation of the Quantum Tunneling of Single Hydrogen Atoms with a Scanning Tunneling Microscope // Physical Review Letters. — 2000. — Vol. 85. — Pp. 4566–4569. — DOI: 10.1103/PhysRevLett.85.4566.
16. *Kantorovich L. V., Krylov V. I.* Approximate Methods of Higher Analysis. — New York: Wiley, 1964.

17. *Абрамовиц М., Стиган И.* Справочник по специальным функциям. — М.: Наука, 1979.
18. *Newton R. G.* Analytic Properties of Radial Wave Functions // *Journal of Mathematical Physics*. — 1960. — Vol. 1, issue 5. — Pp. 319–348. — DOI: 10.1063/1.1703680.
19. Метастабильные состояния составной системы при туннелировании через отталкивающие барьеры / А. А. Гусев, С. И. Виноцкий, О. Чулуунбаатар и др. // *Теоретическая математическая физика*. — 2016. — Т. 186. — С. 27–50. — DOI: 10.4213/tmf8981.
20. Symbolic-Numerical Solution of Boundary-Value Problems with Self-Adjoint Second-Order Differential Equation using the Finite Element Method with Interpolation Hermite Polynomials / А. А. Гусев, О. Chuluunbaatar, S. I. Vinitzky et al. // *Lecture Notes in Computer Science*. — 2014. — Vol. 8660. — Pp. 138–154. — DOI: 10.1007/978-3-319-10515-4_11.
21. О методах вычислительной физики для исследования моделей сложных физических процессов / И. В. Пузынин, Т. Л. Бояджиев, С. И. Виноцкий и др. // *Физика элементарных частиц и атомного ядра*. — 2007. — Т. 38. — С. 144–232.
22. *Pijper E., Fasolino A.* Quantum Surface Diffusion of Vibrationally Excited Molecular Dimers // *Journal of Chemical Physics*. — 2007. — Vol. 126, issue 1. — P. 014708. — DOI: 10.1063/1.2424699.
23. *Mitin A. V.* Unusual Chemical Bonding in the Beryllium Dimer and its Twelve Vibrational Levels // *Chemical Physics Letters*. — 2017. — Vol. 682. — Pp. 30–33. — DOI: 10.1016/j.cplett.2017.05.071.
24. *Merritt J. M., Bondybey V. E., Heaven M. C.* Beryllium Dimer—Caught in the Act of Bonding // *Science*. — 2009. — Vol. 324. — Pp. 1548–1551. — DOI: 10.1126/science.1174326.

© Gusev A. A., 2018

Для цитирования:

Gusev A. A. Finite Element Method of High-Order Accuracy for Solving Two Dimensional Elliptic Boundary-Value Problems of Two and Three Identical Atoms in a Line // *RUDN Journal of Mathematics, Information Sciences and Physics*. — 2018. — Vol. 26, No 3. — Pp. 226–243. — DOI: 10.22363/2312-9735-2018-26-3-226-243.

For citation:

Gusev A. A. Finite Element Method of High-Order Accuracy for Solving Two Dimensional Elliptic Boundary-Value Problems of Two and Three Identical Atoms in a Line, *RUDN Journal of Mathematics, Information Sciences and Physics* 26 (3) (2018) 226–243. DOI: 10.22363/2312-9735-2018-26-3-226-243.

Сведения об авторах:

Гусев Александр Александрович — кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник Лаборатории информационных технологий Объединённого института ядерных исследований (e-mail: gooseff@jinr.ru, тел.: +7(49621)63536)

Information about the authors:

Gusev A. A. — Candidate of Physical and Mathematical Sciences, senior researcher of Laboratory of Information Technologies Joint Institute for Nuclear Research (e-mail: gooseff@jinr.ru, phone: +7(49621)63536)



UDC 004.021:530.182.1

DOI: 10.22363/2312-9735-2018-26-3-244-251

Simple Model of Nonlinear Spin Waves in Graphene Structures

D. S. Kulyabov^{*†}, K. P. Lovetskiy^{*}, Le Anh Nhat^{*}

** Department of Applied Probability and Informatics*

Peoples' Friendship University of Russia (RUDN University)

6 Miklukho-Maklaya str., Moscow, 117198, Russian Federation

† Laboratory of Information Technologies

Joint Institute for Nuclear Research

6 Joliot-Curie, Dubna, Moscow region, 141980, Russian Federation

A series of theoretical and experimental works is known which investigated the magnetic properties of graphene structures. This is due, among other things, to the prospects of using graphene as a material for the needs of the future nanoelectronics and spintronics. In particular, it is known about the presence of ferromagnetic properties at temperatures up to 200 C and above in a single-layer graphene films that are free from impurities. Previously there was proposed a quantum field theoretical model describing the possible mechanism of ferromagnetism in graphene as a result of spontaneous breaking of spin symmetry of the surface density of valence electrons. The possible spatial configurations of the localized spin density were described.

In this paper we investigate such spatially localized nonlinear spin configurations of the valence electron density on the graphene surface such as kinks, and their interactions, as well as quasibound metastable states of the interacting kinks and antikinks, that are breathers. The spectrum of such breathers is investigated. It is shown that under certain conditions, this spectrum has a discrete sector, which, in turn, allows us to speak about the possibility of coherent quantum generation of spin waves in graphene structures, which is important in terms of practical applications in nanoelectronics and spintronics.

Key words and phrases: graphene, solitons, kinks, breathers, nonlinear models

1. Prerequisites of Building a Model of the Graphene Ferromagnetism

Today the standard theoretical model of electronic structure of single-layer graphene film, which had been proposed in [1] and was investigated in a number of works [2–4] is well known. Within this model, not all experimentally observed properties of graphene can be satisfactorily explained. In several works (for example, see [5]) a high-temperature ferromagnetism not caused by any of three possible reasons: impurities, defects, borders, was described, and in [6] processes of spin-polarized current pulses in the graphene film were experimentally observed. We offer and investigate the theoretical model describing collective spin- electronic properties of the single-layered graphene structures forming two-dimensional surfaces, connected with existence on these surfaces of nonzero function of distribution of the spin density formed as a result of spontaneous violation of spin symmetry of valency electrons of atoms of carbon on specified surfaces. As the spin density is proportional to magnetization density, this model allows describing ferromagnetic properties of the graphene structures.

Within the limits of offered model transition from consideration of the discrete two-dimensional carbon lattice forming graphene film, to the continuous two-dimensional surface tensed on this lattice is carried out. The specified two-dimensional surface is configuration space of the model. Thus, we carry out transition to the continual field model. Such approach seems to be natural as it is known that, in particular, in graphene structures the fourth valence sp-electron of carbon is collective, and its wave function isn't localized on a lattice knot. Thus spin states of the wave function of valence electrons

Received 29th June, 2018.

The publication has been prepared with the support of the “RUDN University Program 5-100” and funded by Russian Foundation for Basic Research (RFBR) according to the research project No 16-07-00556.

system of a graphene layer define some function of spin density on two-dimensional configuration space of the model. We will consider this function, as some (classical) nonlinear function of a field on a two-dimensional surface. In considered model function of spin density is admissible trivial, identically equal to zero. Being based on the above-stated experimental data, suppose, that this symmetric field configuration can spontaneously be broken to some physically observed

As we noted earlier [7,8] and as recently it was confirmed in works [9,10], within classical nonrelativistic field model the analog of the well-known Goldstone theorem, according to which each broken generator of initial symmetry of a field system corresponds to the massless scalar not charged boson (which in our case may be called spinon) takes place.

In this case spontaneous violation of spin symmetry within the offered model should lead to existence on graphene surfaces of quasi-particles—spinons (magnons) being vector bosons in the 3rd dimensional physical space and scalar bosons in two-dimensional configuration space of model as a projection the quasi-particle spin on configuration space of the model is always equal to zero.

From the physical point of view essentially that existence of collective effects in spinon system, caused by influence of the total magnetic field created by all spinons on each spinon and spontaneous violation of spin symmetry in such system means nonlinearity of the corresponding field equations and, as a result, existence of the possibility on graphene surfaces of the soliton configurations depending on a form and topology of a surface.

Besides, existence of the collective nonlinear interactions in spinon ensemble should lead to emergence of effective spinon mass by Higgs's mechanism that also should affect observable physical consequences though owing to a small value of such interactions it is hardly possible to expect great values of this mass.

So, it is visible that the equations for the required scalar field which has been set on some two-dimensional surface, should be nonlinear and certain on this surface any, generally speaking, forms and topology. The form and topology in this case define boundary conditions for the field function. The specified function defines conditions of existence, a configuration and dynamics of quasi-particles of this field on the set two-dimensional surface.

In particular, field equations, describing massless nonlinear scalar quasi-particles, known in the quantum theory, possess above specified properties.

Thus, for the description of spinon excitations on graphene surfaces we use one of options of nonlinear field model that allows calculating eigen solutions, effective masses, topological invariants, energy spectra, dynamics of various nonlinear spinon configurations, and other characteristics of the spinon statistical ensemble.

Let's make transition from a discrete set of knots of a 2D hexagonal lattice in which not coupled electrons can be localized, both the corresponding electronic and spin density, to the continual representation of the corresponding configuration space.

The classical field model describing spontaneously broken symmetry is nonlinear. Among nonlinear models the elementary and the known $\lambda\varphi^4$ model is rather well studied. We believe [7,8] that as a first approximation we can describe with its help characteristics of spin waves of interest to us, their spectra in graphene, ferromagnetic domain structure and other characteristics important for the practical applications.

The model has kink and antikink exact solutions and their quasibounded states (breathers), which we will obtain numerically. We will use the energy of the kink-antikink interaction [7,8] for the numerical solution of the Schrödinger equation for modeling quantum dynamics of breathers, underlying the description of spin waves. In model there are quasibounded kink-antikink states, having a discrete spectrum. It allows to put, in particular, a problem of creation of inverse density of population and implementation of quantum generation of spin waves.

Further we will discuss the obtained results and their consequences.

2. Nonlinear Model

Let's consider as an example the nonlinear model $\lambda\varphi^4$ in order to show results of qualitative and numerical research of spin waves in a single-layered graphene film. Let's consider nonlinear model of a scalar field on a two-dimensional surface with the Lagrangian:

$$L\{\varphi\} = \frac{1}{2} (\partial_\nu \varphi \partial^\nu \varphi) - \frac{\lambda}{4} (\varphi^2 - \varphi_0^2)^2, \quad \nu = 0, 1, 2; \quad \varphi = \varphi(x, y, t); \quad \varphi_0 > 0; \quad \lambda > 0. \quad (1)$$

Field function here is proportional to two-dimensional spin density.

The equations of a field and boundary conditions look like

$$[\partial_\nu \partial^\nu - \lambda\varphi_0^2] \varphi - \lambda\varphi^3 = 0; \quad |\varphi(x, y, t)| < \varphi_0, \quad \forall x, y, t. \quad (2)$$

It is known that this nonlinear equation has a set of static vacuum solutions

$$\varphi_{\text{vac}\pm} = \pm\varphi_0. \quad (3)$$

And also kink-antikink solutions

$$\varphi_\pm(x) = \pm\varphi_0 \tanh\left(\sqrt{\frac{\lambda\varphi_0^2}{2}}x\right). \quad (4)$$

In the field of zero kink and antikink have the domain wall dividing areas with opposite signs of magnetization. The elementary magnetic moment in our model is the full magnetic moment of an elementary cell.

We investigate system of interacting kink and antikink, located at a distance $a(t)$ one from another. Let's choose field function in a way

$$\varphi(x, a) = [\varphi_+(x+a) + \varphi_-(x-a) - \varphi_0]; \quad a > 0. \quad (5)$$

We see that field function (5) at small values of a spatially is localized near $x = 0$ and has the following asymptotics:

$$\begin{aligned} \varphi(x, +\infty) &= -\varphi_0; \\ \varphi(+\infty, a) &= -\varphi_0; \quad \varphi(-\infty, a) = -\varphi_0; \\ \varphi'_x(+\infty, a) &= 0; \quad \varphi'_x(-\infty, a) = 0. \end{aligned}$$

We also see that kink and antikink, divided on rather big (in comparison with "thickness" of a kink) distance, nevertheless, keep the form.

Let's consider the Hamilton function of the system:

$$H\{\varphi, a\} = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \left\{ [\partial_\nu \varphi(x, a) \partial^\nu \varphi(x, a)] + \frac{\lambda}{2} [\varphi(x, a)^2 - \varphi_0^2]^2 \right\}. \quad (6)$$

This function can be considered as a function of total energy of the kink-antikink system, and we can formally investigate its dependence on a . Dependence of a Hamiltonian on a corresponds to dependence of potential energy of the kink-antikink interaction on a distance between them. If there are minima of this function, it is natural to expect existence of discrete spectra of the bound states in the kink-antikink system near these minima. It will be interesting breathers.

For quantum mechanical stationary wave function of a breather it is possible to write down the Schrödinger equation:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_b} \frac{d^2}{da^2} + U\{\varphi, a\} \right] \Psi_b(a) = E\Psi_b(a). \tag{7}$$

Here m_b is an effective mass of a breather which is equal to the sum of masses of kink and antikink, $U\{\varphi, a\}$ is a potential part of a total energy of the breather, depending from a , E is an energy of a state. Movement of a breather on the generalized coordinate a physically corresponds to a distance change between kink and antikink.

Let's find the bound states of the kink-antikink system near a minimum of the potential of interaction. This problem can be solved numerically.

3. Numerical Calculations for the Model of Nonlinear Spin Waves in Graphene

Numerical modeling studies start with the approximate solution (5) of (2). To begin with we calculate the dependence $V(a) = H\{\varphi, a\}$ of (6). Calculations were performed using an adaptive procedure, the integration of functions, based on the method of Newton–Cotes with different numerical values of the parameters λ and φ_0 . As an illustration we plot the graph of the function $V_{\lambda, \varphi_0}(a)$ at $\lambda = 0.2$ and $\varphi_0 = 4.0$ (see Fig. 1).

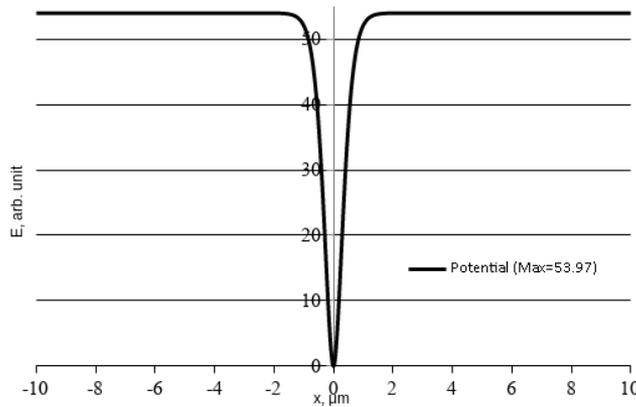


Figure 1. The graph of potential energy breather

As can be seen from the graph, the discrete spectrum of (7) is located in the interval $[0.0; 53.96954]$. With the numerically solved (grid) function $V_{\lambda, \varphi_0}(a)$ we solve the Schrödinger equation (7) by the Ritz method using Hermite functions as coordinate functions. The Ritz method reduces the problem on the axis of the differential equation (7) into eigenvalue and eigenvectors problem for the Ritz matrix, as calculated by the formulas:

$$M_{ij}\{\lambda, \varphi_0\} = \left\langle \psi_i \left| \left(-\frac{\hbar^2}{2m\{\lambda, \varphi_0\}} \frac{d^2}{da^2} + V_{\lambda, \varphi_0}(a) \right) \right| \psi_j \right\rangle, \tag{8}$$

where ψ_i are Hermite functions.

The eigenvectors are sought in the form

$$\varphi_j(\lambda, \varphi_0; a) = \sum_i C_j^i\{\lambda, \varphi_0\} \psi_i, \tag{9}$$

so that the problem on the eigenvalues and eigenvectors is formulated as

$$\hat{M} \{ \lambda, \varphi_0 \} \vec{C}_j \{ \lambda, \varphi_0 \} = E_j \{ \lambda, \varphi_0 \} \vec{C}_j \{ \lambda, \varphi_0 \}. \quad (10)$$

Calculating matrix elements (8) and a solution of (10) were performed in a program. As an illustration we give the five lowest calculated eigenvalues belonging to the discrete spectrum of the operator (7), and the corresponding eigenvectors (grid function) given by (9) for the numerical values of the parameters $\lambda = 0.2$ and $\varphi_0 = 4.0$ (see Fig. 2).

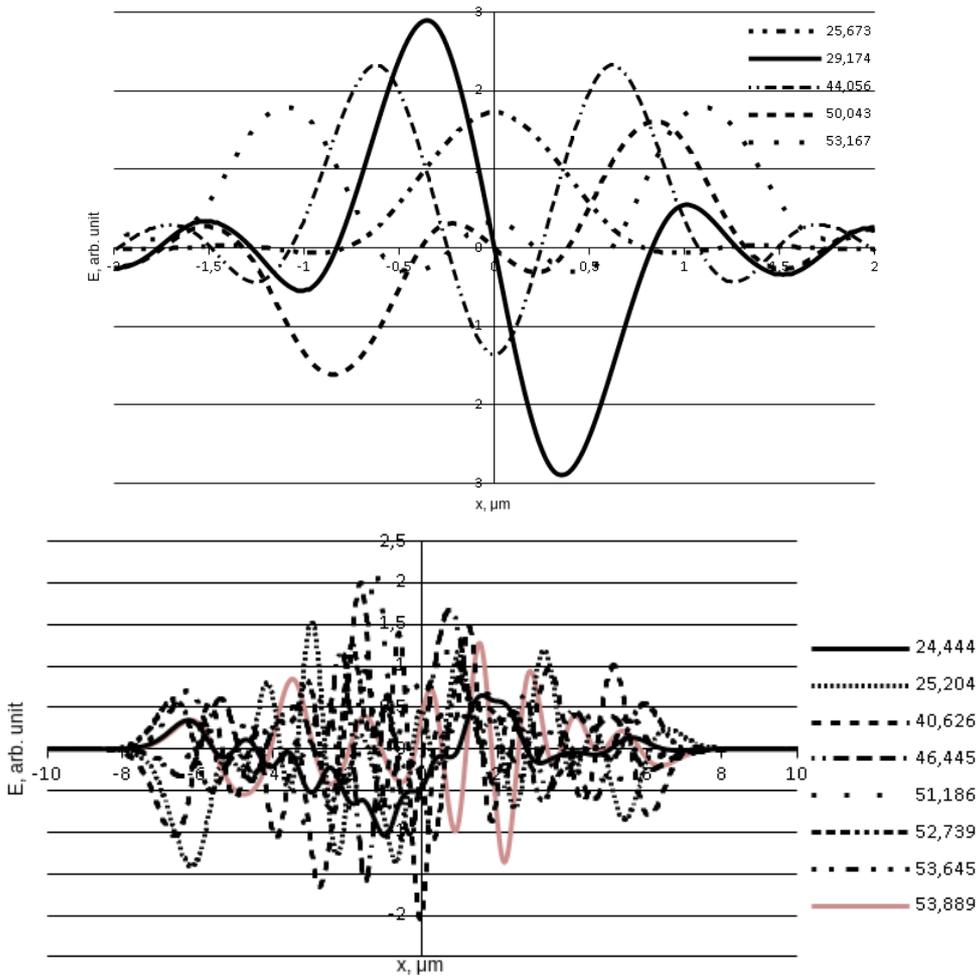


Figure 2. The eigenvalues and eigenfunctions of the original problem

Even these examples indicate a non-trivial structure of the spectrum of eigenvalues of the operator (7). Namely, the structure of the spectrum in Fig. 3. shows the fundamental possibility of population inversion.

This, in turn, confirms our thesis (see [7, 8]) about the possibility of generation of spin waves.

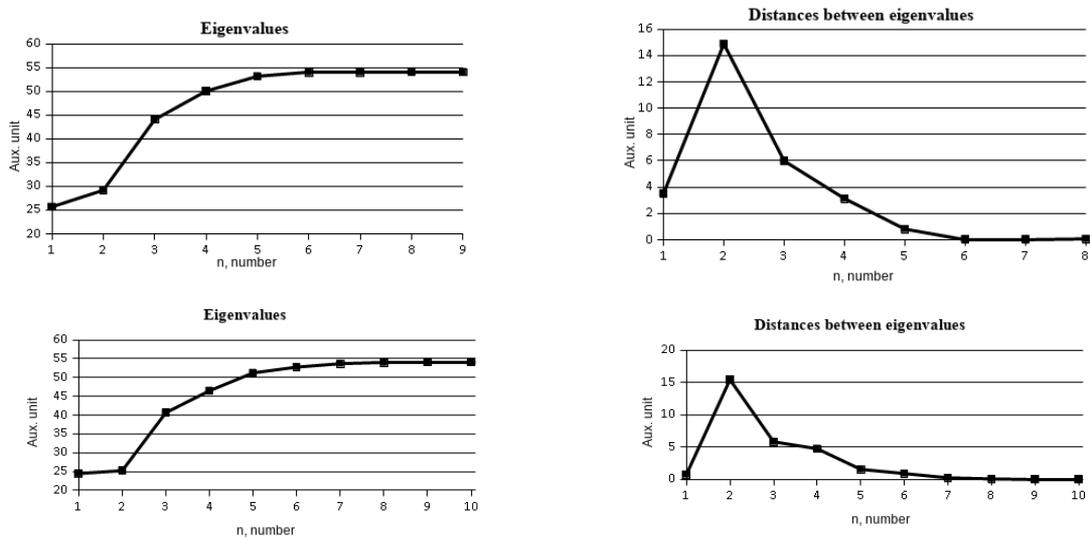


Figure 3. The relative position of the spectral values of the breather

4. Discussions and conclusions

Results of numerical calculations allow to make a number of practically important conclusions. First of all, we see that within the offered nonlinear model existence of metastable kink-antikink bound states for the function of spin density on a two-dimensional graphene surface is possible. These states may form a discrete spectrum. Thus numerical calculations show that interval change between the next levels generally decreases with the energy growth, and since some value of energy the spectrum becomes continuous. At the same time we see that the interval between the next levels, in some local cases, isn't monotonous function, and has local extrema. Existence of such extrema allows to argue that it is possible to expect existence in a energy spectrum of spin-breathers in graphene film of metastable states, which lifetime is more than lifetime of the states being below on energy. In this case we can speak about possibility of creation of inverse density of population in spectra of breathers, and, respectively, about quantum coherent generation of spin waves.

References

1. P. R. Wallace, The Band Theory of Graphite, *Physical Review* 71 (1947) 622–634.
2. D. V. Kolesnikov, V. A. Osipov, The Continuum Gauge Field-Theory Model for Low-Energy Electronic States of Icosahedral Fullerenes, *European Physical Journal B* 49 (2006) 465. arXiv:cond-mat/0510636.
3. K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, M. I. Katsnelson, I. V. Grigorieva, S. V. Dubonos, A. A. Firsov, Two-Dimensional Gas of Massless Dirac Fermions in Graphene, *Nature* 438 (2005) 197–200. doi:10.1038/nature04233.
4. N. M. R. Peres, Electronic Properties of Disordered Two-Dimensional Carbon, *Physical Review B* 73 (2006) 12541. doi:10.1103/PhysRevB.73.125411.
5. Y. Wang, Y. Huang, Y. Song, Z. X., Y. Ma, J. Liang, Y. Chen, Room-Temperature Ferromagnetism of Graphene, *Nano Lett.* 9 (2009) 220–224.
6. N. Tombros, C. Jozsa, M. Popinciuc, H. T. Jonkman, B. J. van Wees, Electronic Spin Transport and Spin Precession in Single Graphene Layers at Room Temperature, *Nature* 448 (2007) 571–574.

7. D. D. Grachev, Y. P. Rybakov, L. A. Sevastyanov, E. F. Sheka, Ferromagnetism in graphene and fullerene structures. theory, modelling, experiment, Bulletin of Peoples' Friendship University of Russia. Series Mathematics, Information Sciences, Physics (1) (2010) 22–27.
8. D. D. Grachev, L. A. Sevastyanov, The Quantum Field Model of the Ferromagnetism in Graphene Films, Nanostructures, Mathematical Physics and Modelling 4 (2011) 5–15.
9. T. Brauner, Spontaneous Symmetry Breaking and Nambu–Goldstone Bosons in Quantum Many-Body Systems, Symmetry 2 (2010) 609–657. doi:10.3390/sym2020609.
10. H. Watanabe, H. Murayama, Unified Description of Non-Relativistic Nambu–Goldstone Bosons, Physical Review Letters 108 (2012) 25160.

УДК 004.021:530.182.1

DOI: 10.22363/2312-9735-2018-26-3-244-251

Простейшая модель нелинейных спиновых волн в графеновых структурах

Д. С. Кулябов*[†], К. П. Ловецкий*, Ле Ань Ньат*

* *Кафедра прикладной информатики и теории вероятностей
Российский университет дружбы народов*

ул. Миклухо–Маклая, д. 6, Москва, Россия, 117198

[†] *Лаборатория информационных технологий*

Объединённый институт ядерных исследований

ул. Жолио–Кюри, д. 6, г. Дубна, Московская область, Россия, 141980

Известен ряд экспериментальных и теоретических работ, в которых исследовались магнитные свойства графеновых структур. Это вызвано перспективами использования графена в качестве материала для нужд будущей наноэлектроники и спинтроники. В частности, известно о наличии ферромагнитных свойств при температурах до 200°С и выше в однослойных плёнках графена, свободных от примесей. Ранее была предложена модель квантового поля, описывающая возможный механизм ферромагнетизма в графене в результате спонтанного нарушения спиновой симметрии поверхностной плотности валентных электронов. Описаны возможные пространственные конфигурации локализованной спиновой плотности.

В этой работе исследуются пространственно локализованные нелинейные спиновые конфигурации плотности валентных электронов на поверхности графена, такие как кинки, их взаимодействие, а также метастабильные состояния взаимодействующих кинков и антикинков, являющихся бризерами. Исследован спектр бризеров. Показано, что при определённых условиях этот спектр имеет дискретный сектор, что, в свою очередь, позволяет говорить о возможности когерентной квантовой генерации спиновых волн в графеновых структурах, что важно с точки зрения практического применения в наноэлектронике и спинтронике.

Ключевые слова: графен, солитоны, кинки, бризеры, нелинейные модели

Литература

1. Wallace P. R. The Band Theory of Graphite // Physical Review. — 1947. — Vol. 71. — Pp. 622–634.
2. Kolesnikov D. V., Osipov V. A. The Continuum Gauge Field-Theory Model for Low-Energy Electronic States of Icosahedral Fullerenes // European Physical Journal B. — 2006. — Vol. 49. — P. 465.
3. Two-Dimensional Gas of Massless Dirac Fermions in Graphene / K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov et al. // Nature. — 2005. — Vol. 438. — Pp. 197–200. — DOI: 10.1038/nature04233.
4. Peres N. M. R. Electronic Properties of Disordered Two-Dimensional Carbon // Physical Review B. — 2006. — Vol. 73. — P. 12541. — DOI: 10.1103/PhysRevB.73.125411.

5. Room-Temperature Ferromagnetism of Graphene / Y. Wang, Y. Huang, Y. Song et al. // *Nano Lett.* — 2009. — Vol. 9. — Pp. 220–224.
6. Electronic Spin Transport and Spin Precession in Single Graphene Layers at Room Temperature / N. Tombros, C. Jozsa, M. Popinciuc et al. // *Nature.* — 2007. — Vol. 448. — Pp. 571–574.
7. Ферромагнетизм в графеновых и фуллереновых наноструктурах. Теория, моделирование, эксперимент / Д. Д. Грачёв, Ю. П. Рыбаков, С. Л. А., Ш. Е. Ф. // Вестник Российского университета дружбы народов. Серия: Математика. Информатика. Физика. — 2010. — № 1. — С. 22–27.
8. *Grachev D. D., Sevastyanov L. A.* The Quantum Field Model of the Ferromagnetism in Graphene Films // *Nanostructures, Mathematical Physics and Modelling.* — 2011. — Vol. 4. — Pp. 5–15.
9. *Brauner T.* Spontaneous Symmetry Breaking and Nambu–Goldstone Bosons in Quantum Many-Body Systems // *Symmetry.* — 2010. — Vol. 2. — Pp. 609–657. — DOI: 10.3390/sym2020609.
10. *Watanabe H., Murayama H.* Unified Description of Non-Relativistic Nambu–Goldstone Bosons // *Physical Review Letters.* — 2012. — Vol. 108. — P. 25160.

© Kulyabov D. S., Lovetskiy K. P., Le Anh Nhat, 2018

Для цитирования:

Kulyabov D. S., Lovetskiy K. P., Le Anh Nhat Simple Model of Nonlinear Spin Waves in Graphene Structures // *RUDN Journal of Mathematics, Information Sciences and Physics.* — 2018. — Vol. 26, No 3. — Pp. 244–251. — DOI: 10.22363/2312-9735-2018-26-3-244-251.

For citation:

Kulyabov D. S., Lovetskiy K. P., Le Anh Nhat Simple Model of Nonlinear Spin Waves in Graphene Structures, *RUDN Journal of Mathematics, Information Sciences and Physics* 26 (3) (2018) 244–251. DOI: 10.22363/2312-9735-2018-26-3-244-251.

Сведения об авторах:

Кулябов Дмитрий Сергеевич — доцент, доктор физико-математических наук, доцент кафедры прикладной информатики и теории вероятностей РУДН (e-mail: kulyabov_ds@rudn.university, тел.: +7(495)9520250)

Ловецкий Константин Петрович — доцент, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры прикладной информатики и теории вероятностей РУДН (e-mail: lovetskiy_kp@rudn.university, тел.: +7(495)9522572)

Ле Ань Ньат (Социалистическая Республика Вьетнам) — аспирант кафедры прикладной информатики и теории вероятностей РУДН (e-mail: leanhnhat@tuyenquang.edu.vn, тел.: +7(495)9522572)

Information about the authors:

Kulyabov D. S. — Associate Professor, Doctor of Sciences in Physics and Mathematics, Associate Professor of Department of Applied Probability and Informatics of Peoples' Friendship University of Russia (RUDN University) (e-mail: kulyabov_ds@rudn.university, phone: +7(495)9520250)

Lovetskiy K. P. — Associate Professor, Candidate of Sciences in Physics and Mathematics, Associate Professor of Department of Applied Probability and Informatics of Peoples' Friendship University of Russia (RUDN University) (e-mail: lovetskiy_kp@rudn.university, phone: +7(495)9522572)

Le Anh Nhat (Socialist Republic of Vietnam) — PhD student of Department of Applied Probability and Informatics of Peoples' Friendship University of Russia (RUDN University) (e-mail: leanhnhat@tuyenquang.edu.vn, phone: +7(495)9522572)



UDC 535;535.3:681.7

DOI: 10.22363/2312-9735-2018-26-3-252-260

Optical Characterization of a Thin-Film Material Based on Light Intensity Measurements

K. P. Lovetskiy*, N. E. Nikolaev†, A. L. Sevastianov*

* *Department of Applied Probability and Informatics*

*Peoples' Friendship University of Russia (RUDN university)
6, Miklukho-Maklaya str., Moscow, 117198, Russian Federation*

† *Institute of Physical Research and Technologies*

*Peoples' Friendship University of Russia (RUDN university)
6, Miklukho-Maklaya str., Moscow, 117198, Russian Federation*

Light interacts with materials in a variety of ways; this article focuses on determination of refraction and absorption characterized by a material's refractive index. We discuss some of the useful models for the frequency dependence of the refractive index, and practical approaches to calculating refractive indices of thin films and thick substrates.

The efficiency of manufacturing of existing and successful creation of new devices of solid-state micro- and nanoelectronics largely depends on the level of development of the technology for manufacturing layers of various materials with a thickness of several nanometers to tens of micrometers. A high degree of perfection of layered structures and particularly structures based on dielectric and/or metallic films with nanometer thickness is needed for their successful application in micro-, nano-, acousto-, microwave and optoelectronics. It is impossible to achieve high degree of perfection without the use of high-precision methods of measuring electrophysical parameters of dielectric and semiconductor materials and structures, metallic films.

We have developed the program "Multilayer", which serves both to simulate the propagation of light through multilayer thin-film layered media, and to determine the dielectric (permittivity tensor of anisotropic films) and geometric (physical and optical thicknesses of the film) parameters of various thin-film coatings. The base mathematical models applied for the description of the light wave propagation through a homogeneous optical medium and for the determination of the optical characteristics of thin layers of optical materials based on the results of light intensity measurements are described. The main mathematical formalism employed in the program is based on solving the Maxwell's equations for propagation of light through anisotropic stratified media. The algorithm uses the Berreman matrices of order 4×4 .

Key words and phrases: transmittance, reflectance, refractive indices determination, thin films

1. Introduction

Methods for the theoretical design of optical coatings, based on modeling the interaction of light with thin-film structures, provide, among other things, reliable production monitoring of thin-film multilayer structures with specified properties [1].

We describe some approaches to the solution of the main problems related to simulation of the optics of multilayer stacks and optical characterization of the used materials. The base mathematical models applied for the description of the light wave propagation through a homogeneous optical medium and for the determination of the optical characteristics of thin and thick layers of optical materials based on the results of light intensity measurements are described. The main mathematical formalism employed in the software is based on solving the Maxwell's equations for propagation of light through anisotropic stratified media. The algorithm uses the Berreman approach and his matrices formalism.

We will consider solutions of the two principal problems in optics. The first problem consists in determining the properties of various optical systems for the given optical parameters of components. The second problem, inverse to the first one, is to determine

Received 29th June, 2018.

This research was supported by RFBR grant No. 18-07-00567. The publication has been prepared with the support of the "RUDN University Program 5-100".

the optical parameters — refractive indices and absorption coefficients — from the measured intensities of transmitted and reflected polarized light waves.

Practical mathematical models techniques for determining the optical parameters of thin films are outlined.

- **Direct problem** consists in simulation of the optical properties of various multilayer systems for preset characteristics of the whole stacks for a given configuration of the light wave field.
- **Inverse problem** means evaluation of refractive indices of transparent homogeneous layers (and their thicknesses) incorporated into multilayer stack using the results of optical measurements.

The solutions of both problems have to be found in a certain spectral range, that is, over a certain interval of wavelengths. The main elements of mathematical models used for the formulation and solution of these problems are the wave theory of light, Maxwell's equations, and the properties of the permittivity tensor of a material. Solution of the inverse problem is based on the main property of dielectric constant: its real and imaginary parts are connected to each other by the Kramers–Kronig relation.

Let us discuss some available approaches of mathematical modeling of light interaction with isotropic or anisotropic layered materials.

2. Muller Calculus

Mueller calculus is a matrix method for manipulating Stokes vectors, which represent the polarization of incoherent light. It was developed in 1943 by Hans Mueller, then a professor of physics at the Massachusetts Institute of Technology. Light which is unpolarized or partially polarized must be treated using Mueller calculus, while fully polarized light can be treated with either Mueller calculus or the simpler Jones calculus. Coherent light generally must be treated with Jones calculus because the latter works with amplitude rather than intensity of light. The effect of a particular optical element is represented by a Mueller matrix; which is a 4×4 matrix and a generalization of the Jones matrix.

Any fully polarized, partially polarized, or unpolarized state of light can be represented by a Stokes vector (S). Any optical element can be represented by a Mueller matrix (M).

If a beam of light is initially in the state S_i and then passes through an optical element M and comes out in a state S_0 , then it is written $S_0 = MS_i$.

The Muller matrix is used for analytical description of the action of optical elements on polarized light beams. This square matrix (linear operator) with real coefficients describes a change in the Stokes vector upon the passage through a given optical element. In contrast to the method employing the Jones matrix, which is applicable only to description of the light transmission via nondepolarizing optical elements, the Muller method can be used to describe the depolarizing systems as well. This is possible because the Muller matrix establishes a relation between time-averages intensities of various polarization components of the incident and transformed light beams, rather than between the amplitudes and phases of oscillations.

The transmission of light via optical components leads to a change in the state of the four-component Stokes vector:

$$S^{\text{before}} \rightarrow S^{\text{after}}.$$

This change can be analytically described using the Muller matrix as

$$S^{\text{after}} = MS^{\text{before}} = \begin{bmatrix} m_{00} & m_{01} & m_{02} & m_{03} \\ m_{10} & m_{11} & m_{12} & m_{13} \\ m_{20} & m_{21} & m_{22} & m_{23} \\ m_{30} & m_{31} & m_{32} & m_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} S_0^{\text{before}} \\ S_1^{\text{before}} \\ S_2^{\text{before}} \\ S_3^{\text{before}} \end{bmatrix}.$$

In the case of an optical system comprising several elements, the Muller matrix of the total system is a product of the matrices of individual components in the order of light transmission. The matrices of elements successively passed by the light beam are written left to right:

$$S^{\text{after}} = M_K M_{K-1} \dots M_2 M_1 S^{\text{before}}.$$

The elements of the Muller matrix can be calculated using the results of measurements of the Stokes vector components. The problem of reconstruction of the Muller matrix (operator) proceeding from the Stokes vector components measured at the input and output of an optical system belongs to the class of so-called ill-posed problems. For correctly solving this problem it is necessary not only to perform thorough measurements, but also to use numerical methods of solving ill-posed problems — a special mathematical apparatus developed for the processing of such data [2].

3. Berreman Matrix Method and Calculation Techniques for Thin Layers

There are several approaches to the description of light waves propagating through a layered, in the general case anisotropic medium. These approaches are based on the use of classical models [3, 4], the classical method of Jones' matrix [4, 5], the extended Jones' matrix method [5], and the Berreman's matrix method [6]. The choice of a particular method is determined by the conditions of application. The extended (4×4 matrix) Jones method and the Berreman method are considered universal.

The main criteria for selecting a method to be used in our case are the possibility to deal with arbitrary parameters (polarization, angle of incidence) of the input light wave and to take into account multiple reflections at interfaces between layers of an optical system. Both the extended (4×4 matrix) Jones method and the Berreman method meet these conditions, but isotropic systems are more conveniently described in terms of the classical methods [4], which is especially important in solving the inverse problems. For these reasons, the mathematical apparatus and software program are formulated, where possible, so as to use any of the three methods:

- the Berreman's matrix method (below, merely the matrix method), which is applicable to materials of any type and optical system of arbitrary configuration;
- the classical method, to be used in the case of isotropic materials and optical systems with no more than two layers;
- a combined method, which is convenient for use in the case of two-layer structures on thick isotropic substrates.

The main mathematical relationships for an arbitrary incident light wave in the classical description taking into account multiple reflections in one- or two-layer system have been presented above. Below we will concentrate on the matrix method.

It should be noted that calculations involved in solution of the direct problems related to the simulation of multilayer structures and devices are more conveniently performed using the matrix method even for simple isotropic materials. This is explained by the fact that the matrix method allows a greater number of parameters of the transmitted and reflected light to be calculated as compared to that involved in simple classical calculations.

4. Matrix Calculation Method

Let us consider the method of calculation of the transmitted and reflected light waves, which is based on the matrix approach and developed in [6, 7]. The main idea of this algorithm, which is frequently called the Berreman 4×4 matrix method, consists in using the exact transformations of Maxwell's equations in the matrix form under the condition that the optical medium (layer) is isotropic in the Z axis direction.

Using the Berreman matrix, which is the matrix of transformation of a linear differential equation, it is possible to take into account the interference effects accompanying multiple reflections between layers in a system studied. Eventually, this matrix determines a linear transformation converting tangential components of the electric and magnetic fields in the light wave at the input of the given optical system into the corresponding components of reflected and transmitted waves at the output.

The algorithm under consideration deals with the general case of a refractive index ellipsoid (Fresnel ellipsoid) of arbitrary size and orientation. Let a light beam be incident in the OXZ plane at an angle α relative to the Z axis.

Under these conditions, the tangential components of the electric and magnetic fields of the light wave obey the following matrix relation [6, 7]:

$$\frac{\partial}{\partial z} \begin{pmatrix} E_x \\ H_y \\ E_y \\ -H_x \end{pmatrix} = -\frac{i\omega}{c} \Delta \begin{pmatrix} E_x \\ H_y \\ E_y \\ -H_x \end{pmatrix}, \tag{1}$$

where E, H are the complex components of the electromagnetic wave, ω is the wave frequency, and c is the speed of light. The elements of matrix Δ are complex quantities and can be expressed using well-known formulas [6] via components of the permittivity tensor and parameters of the incident wave. If the elements of matrix Δ are independent of z , a solution of this linear system can be written in terms of the matrix exponent as

$$\chi(z) = \exp\left(\frac{i\omega z}{c} \Delta\right) \chi(0) \equiv P(z)\chi(0), \tag{2}$$

where $\chi(z) = (E_x, H_y, E_y, -H_x)^T$ and $P(z)$ is the Berreman 4×4 matrix for the given homogeneous optical medium.

As can be seen from equation (2), the Berreman matrix of this system has the form of exponent of the matrix. In the general case, calculation of the matrix exponent is a nontrivial task. Berreman suggested to use an approximate formula for the matrix exponent, but this approach is not always convenient and requires great care in selecting the discretization step. However, in the case under consideration, it is possible to develop an effective algorithm for determining the Berreman matrix.

Determination of the matrix exponent is based on the calculation of eigenvalues and eigenvectors of matrix Δ , which is achieved using a highly effective algorithm. If all the eigenvalues of Δ are different, the matrix exponent can be constructed using the Silvester formula

$$P(h) = \exp(i\omega h \Delta/c) = \sum_{k=1}^4 \left(\exp(i\omega h \lambda_k/c) \frac{\prod_{i \neq k} (\Delta - \lambda_i I)}{\prod_{i \neq k} (\lambda_k - \lambda_i)} \right), \tag{3}$$

where λ_k are the eigenvalues of Δ .

If the eigenvalues of Δ coincide, formula (3) is inapplicable. However, in such cases, it is possible to use the Jordan canonical form [8] that provides for a sufficiently effective solution of the system of differential equations in that case and leads to a required result.

The reflection and transmission of light are described using the relations

$$\chi_T = P(z)(\chi_I + \chi_R), \tag{4}$$

where

$$\chi_I = (E_x, r_x E_x, E_y, r_y E_y)^T \quad (\text{incident wave vector}),$$

$$\chi_R = (R_x, -r_x R_x, R_y, -r_y R_y)^T \quad (\text{reflected wave vector}),$$

$$\chi_T = (T_x, r_x^* T_x, T_y, r_y^* T_y)^T \quad (\text{transmitted wave vector}),$$

$$r_x = \frac{n_1}{\cos \alpha_1}, \quad r_y = n_1 \cos \alpha_1, \quad r_x^* = \frac{n_2}{\cos \alpha_2}, \quad r_y^* = n_2 \cos \alpha_2,$$

n_1 and n_2 are the refractive indices of homogeneous entrance and exit media, and α_1 and α_2 are the beam angles in the entrance and exit media, respectively. The parameters n_i and α_i obey Snell's law

$$n_1 \sin \alpha_1 = n_2 \sin \alpha_2.$$

It should be noted that the above representation of vectors χ_I , χ_T , χ_R is valid only for isotropic media, featuring single-valued relations between the components of electric and magnetic fields. Here and in what follows, the entrance and exit media are assumed to be homogeneous.

Solution of the system of equations (4) reduces to solution of a linear algebraic system of two equations with two variables (unfortunately, this system can be degenerate). A solution can be obtained using a regularized stable method, which effectively works for any input parameters.

The obtained values of components T_x , T_y , R_x , R_y are used as a basis for calculations of the main parameters of the reflected and transmitted light beams, including reflection and transmission coefficients, Stokes vectors, and degrees of depolarization. In particular, the reflection and transmission coefficients are given by the formulas

$$T = \frac{n_2 \cos \alpha_2}{n_1 \cos \alpha_1} \frac{|T_x / \cos \alpha_2|^2 + |T_y|^2}{|E_x / \cos \alpha_1|^2 + |E_y|^2}, \quad R = \frac{|R_x / \cos \alpha_1|^2 + |R_y|^2}{|E_x / \cos \alpha_1|^2 + |E_y|^2}.$$

5. Calculations for Thick Layers

Unfortunately, the above method encounters difficulties in application to thick layers. Propagation of a wave in a thick layer is accompanied by multiple reflections that result in a phase shift, which is greater than the phase shift corresponding to the coherency of light. However, no such oscillations take place in real systems, where the interference pattern is usually smeared. It is also possible to assume that the accuracy of a measuring instrument (e.g., spectrophotometer) is lower than the period of these oscillations, which results in their averaging in the course of measurements.

The transition matrix of a thick (or arbitrary) layer can be calculated using equation (4). For a large layer thickness (relative to the light wavelength), the imaginary component of the argument, $\exp(i\omega h \lambda_k / c)$ acquires large values, which leads to significant oscillations in the calculated spectra of both reflection and transmission coefficients. In order to bring the measured data into correspondence with the results of calculations using equation (4), it is necessary to average the latter results. This averaging is performed on a random lattice with respect to the wavelength interval $\Delta\lambda$, as determined by the light coherence length Δl determined for spectrophotometers using the relation

$$\Delta l = \lambda^2 / \Delta\lambda.$$

6. Combined Calculation Method

In solving the inverse problem for determining the parameters of an anisotropic layer on a thick isotropic substrate, it is convenient to use a combined method, whereby the transmission of the anisotropic layer is described using the matrix technique and the substrate properties are calculated in terms of the classical method. It should be noted

that this approach can be used only for the calculation of transmitted and reflected light intensities. However, these very variables are measured by spectrophotometry and serve as the input data for the inverse problem in the case under consideration.

Figure 1 illustrates the scheme of calculations according to the combined method. Here, \bar{T}_{02} is the total energy of the primary wave transmitted from the entrance medium (medium #0) to substrate (medium #2), \bar{R}_{01} is the total energy of the primary wave reflected from the first (between layers #0 and #1) interface, \bar{T}_{20} is the energy of the wave reflected from the second (between layers #2 and #3) interface and transmitted back to the entrance medium, and \bar{R}_{21} is the total energy of the wave reflected from the 2/1 interface, with allowance for the multiple reflection of light in the thin film layer.

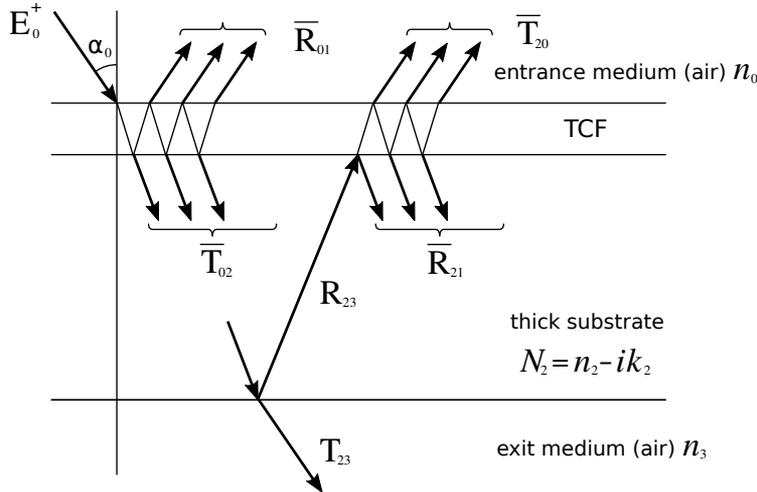


Figure 1. Propagation of an electromagnetic wave through a two-layer system

By using the proposed combined method, it is possible to significantly reduce the time required for solving the inverse problem.

Methods described above serve a basis for calculations of the light transmission and reflection in the direct and inverse optical problems.

7. Conclusion

The main input parameters of a light wave are the intensity, the polarization, and the angle of incidence. The main optical characteristics of materials in both direct and inverse problems are the permittivity tensor ε and the thickness d of a given material.

The main output optical properties of a system in the direct (simulation of optical behavior of multilayer stack) problem are the transmission and reflection of light intensity for the light of different wave lengths and incident at various angles. In the inverse problem, these characteristics are usually considered as the initial data. In the direct problem, additional output characteristics (calculated from the values of transmission and reflection) can be the Stokes vectors of the transmitted and reflected light, the degree of polarization, phase shifts, contrast ratio, efficiency, color coordinates, color rendering, and some others.

It should be noted that the process of determination of the material parameters from measured data (inverse problem solution) involves multiply repeated solution of the direct problem, which is necessary for selecting the unknown values of permittivities. For this reason, effective solution of the direct problem plays a key role in the entire mathematical formalism and software.

Another important circumstance is that the thicknesses of films are frequently known only approximately. However, even very small variations of the film thickness (within 2–10 nm) may lead to significant changes in the interference pattern for both transmission and reflection of light. Therefore exact determination of the film thickness is very important (and also is an unknown parameter) in solving the inverse problem.

References

1. A. V. Tikhonravov, M. K. Trubetskov, T. V. Amotchkina, “Optical Monitoring Strategies for Optical Coating Manufacturing”, Chapter 3, Elsevier, 2018. doi:10.1016/B978-0-08-102073-9.00003-5.
2. A. Tikhonov, V. Arsenin, “About Solution of Degenerate and Ill-Posed Linear Algebraic Equations”, Chapter 3, Winston and Sons, 1977.
3. M. Born, E. Wolf, “Basic Properties of the Electromagnetic Fields” and “Elements of the Theory of Interference and Interferometers”, Chap. 1 and Chap. 7, 5th Edition, Pergamon Press, NY, 1975.
4. R. M. A. Azzam, N. M. Bashara, “Propagation of Polarized Light Through Polarizing Optical Systems” and “Reflection and Transmission of Polarized Light by Stratified Planar Structures”, Chap. 2 and Chap. 4, Elsevier, Amsterdam, 1977.
5. P. Yeh, C. Gu, “Electromagnetic Propagation in Anisotropic Media”, “Jones Matrix Method” and “Extended Jones Matrix Method”, Chap. 3, Chap. 4 and Chap. 8, John Wiley & Sons Inc., 1999.
6. D. W. Berreman, Optics in Stratified and Anisotropic Media: 4×4 -Matrix Formulation, J. Opt. Soc. Amer. 62 (4) (1972) 502–510.
7. S. P. Palto, An Algorithm for Solving the Optical Problem for Stratified Anisotropic Media, JETP 92 (4) (2001) 552–560.
8. R. Bellman, Introduction to Matrix Analysis, 2nd Edition, Soc. for Industrial and Applied Math., Philadelphia, PA, USA, 1997.

УДК 535;535.3;681.7

DOI: 10.22363/2312-9735-2018-26-3-252-260

Определение оптических свойств материала тонких плёнок на основе измерений интенсивности света

К. П. Ловецкий*, Н. Э. Николаев†, А. Л. Севастьянов*

* *Кафедра прикладной информатики и теории вероятностей
Российский университет дружбы народов
ул. Миклухо-Маклая, д. 6, Москва, Россия, 117198*

† *Институт физических исследований и технологий
Российский университет дружбы народов
ул. Миклухо-Маклая, д. 6, Москва, Россия, 117198*

Свет взаимодействует с материалами различными способами; данная статья посвящена определению преломления и поглощения, характеризуемым показателем преломления материала. Обсуждаются некоторые полезные модели частотной зависимости показателя преломления, а также практические способы расчёта показателей преломления тонких плёнок и толстых подложек.

Эффективность производства существующих и успешное создание новых приборов твердотельной микро- и наноэлектроники во многом зависит от уровня развития технологии изготовления слоёв различных материалов толщиной от нескольких нанометров до десятков микрометров. Достижение высокой степени совершенства слоистых структур и, в частности, структур на основе нанометровых диэлектрических и/или металлических плёнок, которое и определяет возможность их успешного применения в микро-, нано-, акусто-

СВЧ- и оптоэлектронике, невозможно без использования высокоточных методов измерений электрофизических параметров диэлектрических и полупроводниковых материалов и структур, металлических плёнок.

Разработана программа «Многослойность», которая служит как для моделирования распространения света через многослойные тонкоплёночные слоистые среды, так и для определения диэлектрических (тензор диэлектрической проницаемости анизотропных плёнок) и геометрических (физическая и оптическая толщина плёнка) параметров различных тонкоплёночных покрытий. Дано описание основных математических моделей, применяемых для описания распространения световой волны в однородной оптической среде и для определения оптических характеристик тонких слоёв оптических материалов на основе результатов измерений интенсивности света. Математический формализм, используемый в программе, основан на решении уравнений Максвелла при распространении света через анизотропную слоистую среду. Алгоритм использует матрицы Берремана порядка 4×4 .

Ключевые слова: коэффициент пропускания, коэффициент отражения, определение показателей преломления, тонкие плёнки

Литература

1. *Tikhonravov A. V., Trubetskov M. K., Amotchkina T. V.* “Optical Monitoring Strategies for Optical Coating Manufacturing”, Chapter 3 // *Optical Thin Films and Coatings*. — Elsevier, 2018. — DOI: 10.1016/B978-0-08-102073-9.00003-5.
2. *Tikhonov A., Arsenin V.* “About Solution of Degenerate and Ill-Posed Linear Algebraic Equations”, Chapter 3 // *Solutions of Ill-Posed Problems*. — Winston and Sons, 1977.
3. *Born M., Wolf E.* “Basic Properties of the Electromagnetic Fields” and “Elements of the Theory of Interference and Interferometers”, Chap. 1 and Chap. 7 // *Principles of Optics*. — 5 edition. — NY: Pergamon Press, 1975.
4. *Azzam R. M. A., Bashara N. M.* “Propagation of Polarized Light Through Polarizing Optical Systems” and “Reflection and Transmission of Polarized Light by Stratified Planar Structures”, Chap. 2 and Chap. 4 // *Ellipsometry and Polarized Light*. — Amsterdam: Elsevier, 1977.
5. *Yeh P., Gu C.* “Electromagnetic Propagation in Anisotropic Media”, “Jones Matrix Method” and “Extended Jones Matrix Method”, Chap. 3, Chap. 4 and Chap. 8 // *Optics of Liquid Crystal Displays*. — John Wiley & Sons Inc., 1999.
6. *Berreman D. W.* Optics in Stratified and Anisotropic Media: 4×4 -Matrix Formulation // *J. Opt. Soc. Amer.* — 1972. — Vol. 62, No 4. — Pp. 502–510.
7. *Palto S. P.* An Algorithm for Solving the Optical Problem for Stratified Anisotropic Media // *ЖЕТП*. — 2001. — Vol. 92, No 4. — Pp. 552–560.
8. *Bellman R.* Introduction to Matrix Analysis. — 2nd edition. — Philadelphia, PA, USA: Soc. for Industrial and Applied Math., 1997. — ISBN 0-89871-399-4.

© Lovetskiy K. P., Nikolaev N. E., Sevastianov A. L., 2018

Для цитирования:

Lovetskiy K. P., Nikolaev N. E., Sevastianov A. L. Optical Characterization of a Thin-Film Material Based on Light Intensity Measurements // *RUDN Journal of Mathematics, Information Sciences and Physics*. — 2018. — Vol. 26, No 3. — Pp. 252–260. — DOI: 10.22363/2312-9735-2018-26-3-252-260.

For citation:

Lovetskiy K. P., Nikolaev N. E., Sevastianov A. L. Optical Characterization of a Thin-Film Material Based on Light Intensity Measurements, *RUDN Journal of Mathematics, Information Sciences and Physics* 26 (3) (2018) 252–260. DOI: 10.22363/2312-9735-2018-26-3-252-260.

Сведения об авторах:

Ловецкий Константин Петрович — доцент, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры прикладной информатики и теории вероятностей РУДН

(e-mail: lovetskiy_kp@rudn.university, тел.: +7(495)9522572)

Николаев Николай Эдуардович — кандидат физико-математических наук, доцент Института физических исследований и технологий РУДН (e-mail: nikolaev_ne@pfur.ru, тел.: +7 (495) 9550898)

Севастьянов Антон Леонидович — кандидат физико-математических наук, доцент кафедры прикладной информатики и теории вероятностей РУДН (e-mail: sevastianov_al@rudn.university, тел.: +7(495)9522572)

Information about the authors:

Lovetskiy K. P. — Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor of Department of Applied Probability and Informatics of Peoples' Friendship University of Russia (RUDN University) (e-mail: lovetskiy_kp@rudn.university, phone: +7(495)9522572)

Nikolaev N. E. — Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor of Institute of Physical Research and Technologies of Peoples' Friendship University of Russia (RUDN university) (e-mail: nikolaev_ne@pfur.ru, phone: +7 (495) 9550898)

Sevastianov A. L. — Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor of Department of Applied Probability and Informatics of Peoples' Friendship University of Russia (RUDN University) (e-mail: sevastianov_al@rudn.university, phone: +7(495)9522572)

Информатика и вычислительная техника

УДК 621.39

DOI: 10.22363/2312-9735-2018-26-3-261-271

Процедура установления соединения по радиоканалу случайного доступа с возможностью ретрансляции

О. В. Семенова*, А. С. Власкина*, Е. Г. Медведева*,
Э. Р. Зарипова*, И. А. Гудкова*[†]

* *Кафедра прикладной информатики и теории вероятностей
Российский университет дружбы народов
ул. Миклуко-Маклая, д. 6, Москва, Россия, 117198*

[†] *Институт проблем информатики
Федеральный исследовательский центр «Информатика и управление» РАН
ул. Вавилова, д. 44, корп. 2, Москва, Россия, 119333*

В связи с быстро растущим числом абонентских устройств, функционирующих в сети беспроводной мобильной связи LTE (Long-Term Evolution), возникла необходимость поиска методов снижения пользовательской и обслуживающей сигнальной нагрузки. Для сокращения объёмов сетевых ресурсов создаются правила, упрощающие взаимодействие устройств внутри сети. В данной статье исследуется процедура установления соединения между устройством и базовой станцией LTE. Одно из возможных решений задачи передачи малых данных, генерируемых при межмашинном соединении (M2M, Machine-to-Machine), было представлено в техническом отчёте TR 37.868 консорциума 3GPP (3rd Generation Partnership Project). Данное предложение подразумевает использование радиоканала случайного доступа RACH (Random Access Channel) для соединения между устройствами. Эффективное использование процедуры установления соединения по радиоканалу случайного доступа основывается на анализе вероятностно-временных характеристик, таких как вероятность успешного и неуспешного установления соединения, средняя задержка успешного установления соединения. В данной статье исследована зависимость перечисленных характеристик от вероятности коллизии, возможной при передаче преамбулы, и граничных условий на количество возможных ретрансляций сообщений, используемых в процедуре установления соединения. Точность и достоверность расчётов, получаемых при использовании предлагаемой аналитической модели, была проверена с помощью имитационного моделирования на языке R.

Ключевые слова: межмашинное соединение, канал случайного доступа (RACH), коллизия, среднее время установления соединения, вероятность успешного установления соединения

1. Введение

Современные сети связи пятого поколения 5G широко используют радиоканал случайного доступа RACH для установления соединения с целью передачи данных по технологиям межмашинного взаимодействия [1]. Высокоприоритетная сигнальная конструкция в процедуре установления соединения является синхронной и требует выполнения соответствий по допустимой задержке. Важно анализировать ключевые вероятностно-временные метрики функционирования сети, представленные в релизе 11 стандарта TR 37.868 [2] консорциума 3GPP, такие как время реагирования (задержка) датчика от момента инициации соединения до момента начала передачи данных, вероятность успешного установления соединения и вероятность неуспешного установления соединения. Процедура передачи сигнальных сообщений заключается

Статья поступила в редакцию 6 апреля 2018 г.

Публикация подготовлена при поддержке Программы РУДН «5-100» и при финансовой поддержке РФФИ в рамках научных проектов № 16-07-00766 и № 18-07-00576.

в пересылке сообщений между базовой станцией (eNB, eNodeB) и конечным устройством (UE, User Equipment). Соединение устанавливается при успешной пересылке четырёх сообщений (Msg1, Msg2, Msg3, Msg4). При этом в беспроводных сетях LTE (Long-Term Evolution) успешное выполнение процедуры подразумевает корректную передачу последнего сообщения (Msg4).

Разработчиками ведутся исследования по оптимизации алгоритмов взаимодействия устройств, направленные на эффективное использование радиоканала RACH: увеличение пропускной способности сети, успешная передача преамбул и сигнальных сообщений, эффективное использование ресурсов сети. В [3] был предложен подход к анализу процедуры установления соединения между оборудованием пользователя и базовой станцией, в [4] разработана аналитическая модель процедуры установления соединения с возможностью ретрансляции сообщений Msg1 и Msg3. Имитационное моделирование процедуры установления соединения в [5] предоставило возможность адаптировать параметры RACH для увеличения вероятности успешного соединения и уменьшения среднего времени установления соединения. В работе [6] была исследована зависимость вероятности коллизии от количества M2M-устройств в условиях быстро растущего M2M-трафика и большого количества M2M-устройств, которым необходима поддержка подключения к единой точке доступа.

Целью текущей работы является разработка аналитической модели процедуры установления соединения по радиоканалу случайного доступа RACH с возможностью ретрансляции трёх сообщений (Msg1, Msg3, Msg4) для вычисления вероятностно-временных показателей системы. В отличие от известных результатов [4, 5], в данной работе исследуется возможность ретрансляции последнего сообщения (Msg4, Connection Response), которое является подтверждённым ответом на установление соединения. Подобные подходы предлагались и ранее, например, в [7, 8], а также в работе [9], где был предложен аналитический подход к решению в замкнутой форме, продолжением которой является данное исследование.

Статья организована следующим образом. В разделе 2 описаны ключевые аспекты процедуры установления соединения по радиоканалу случайного доступа RACH, определены необходимые временные интервалы процедуры установления соединения и изменения этих интервалов в случае неуспешной передачи сообщений. Раздел 3 описывает процедуру «четырёх рукопожатий» в виде последовательной передачи четырёх сообщений, приведены формулы для расчёта показателей эффективности процедуры с учётом трёх сообщений. Численный анализ характеристик и задачи дальнейших исследований представлены в разделах 4 и 5 соответственно.

2. Процедура установления соединения

Процедура установления соединения по каналу случайного доступа RACH состоит из четырёх шагов, представленных на рис. 1, которые могут быть разделены на два этапа: этап синхронизации связи (Msg1, Msg2) и этап передачи обслуживания (Msg3, Msg4).

Инициация процедуры установления соединения начинается с отправки первого сообщения Msg1 (Preamble Transmission) [10] от устройства UE к базовой станции eNB, при этом выбирается одна из 64 возможных преамбул RACH. Значения преамбул различают запросы, поступающие от устройств. При передаче от нескольких устройств в одном временном слоте одинаковых преамбул возникает коллизия. Если M2M-устройство не получает ответа Msg2 (RAR, Random Access Response) от базовой станции, то пользовательское устройство увеличивает мощность и снова передаёт преамбулу после окончания фиксированного интервала времени. В случае успешного обмена сообщениями Msg1 и Msg2 заканчивается этап синхронизации, и M2M-устройство передаёт следующее сообщение-запрос Msg3 (Connection Request). Затем автоматический запрос повтора передачи HARQ ACK (Hybrid Automatic

Repeat Request) позволяет защитить передачу сигнальных сообщений. При успешной передаче и обработке Msg3 базовая станция отвечает сообщением-разрешением Msg4 (Connection Response). Если устройство не получило сообщение Msg4 от базовой станции, то по истечению заданного временного интервала сообщение Msg4 будет отправлено повторно. Заметим, что при достижении граничного значения количества ретрансляций преамбулы Msg1 процедура инициализации соединения считается неуспешной, при превышении порога количества ретрансляций передачи сообщений Msg3/Msg4 необходима новая передача преамбулы Msg1.

Расчёт продолжительности процедуры установления соединения по каналу RACH оценивается от начала момента инициации до начала передачи данных [3] и может быть получен суммированием соответствующих временных интервалов. В текущей работе авторы придерживаются обозначений, введённых в [4, 7]: Δ_1 — время синхронизации до передачи Msg1; T_{RAR} — время обработки, необходимое eNB для обнаружения преамбулы (Msg1); W_{RAR} — временной интервал, отведённый для ответа Msg2; $\Delta_1 + T_{RAR} + W_{RAR} + \Delta_2$ — временной интервал от начала процедуры до отправки сообщения Msg3 (при успешной пересылке сообщения Msg1); $\Delta_1 + T_{RAR} + W_{RAR} + W_{BO}$ — временной интервал от начала процедуры до повторной передачи преамбулы (при неуспешной пересылке сообщения Msg1); T_{HARQ} — временной интервал, необходимый для приёма сообщения HARQ ACK; T_{AM_4} — временной интервал перед передачей сообщения Msg4; T_{M_3} — временной интервал перед повторной передачей сообщения Msg3; T_{M_4} — временной интервал перед повторной передачей сообщения Msg4.

На рис. 1 представлена диаграмма последовательностей сообщений в процедуре установления соединения без ретрансляций с указанием временных интервалов.

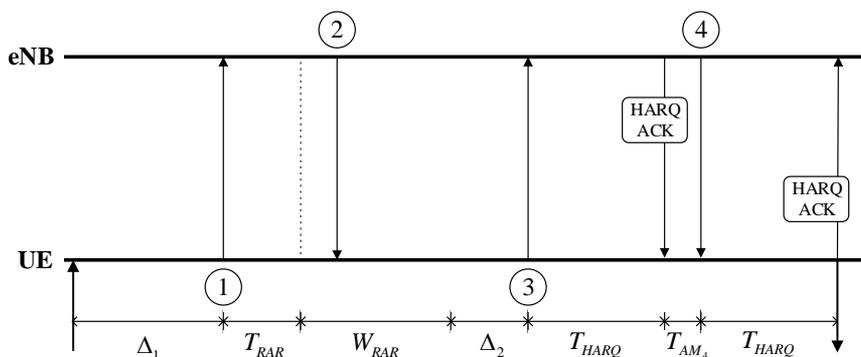


Рис. 1. Диаграмма последовательности сообщений без коллизий

3. Математическая модель процедуры установления соединения

При исследовании процедуры установления соединения по радиоканалу RACH было замечено, что наличие ретрансляций усложняет анализ вероятностно-временных характеристик из-за большого количества возможных вариантов, приводящих к установлению соединения. Для представления расчётов введём вероятностные события:

$$\begin{aligned}
 A_1 &= \{\text{Msg1 передано успешно}\}, & \overline{A_1} &= \{\text{Msg1 заблокировано}\}, \\
 A_3 &= \{\text{Msg3 передано успешно}\}, & \overline{A_3} &= \{\text{Msg3 заблокировано}\}, \\
 A_4 &= \{\text{Msg4 передано успешно}\}, & \overline{A_4} &= \{\text{Msg4 заблокировано}\}.
 \end{aligned}$$

Для процедуры установления соединения необходима успешная передача четырёх сообщений Msg1, Msg2, Msg3, Msg4 с количеством ретрансляций, не превосходящим заранее заданные граничные значения N_1, N_3, N_4 для сообщений Msg1, Msg3, Msg4 соответственно. Обозначим вероятности введённых событий:

$$\begin{aligned}
 P(A_1) &= 1 - p_1 = \bar{p}_1, & P(\bar{A}_1) &= p_1, \\
 P(A_3) &= 1 - p_3 = \bar{p}_3, & P(\bar{A}_3) &= p_3, \\
 P(A_4) &= 1 - p_4 = \bar{p}_4, & P(\bar{A}_4) &= p_4.
 \end{aligned}$$

На рис. 2 показана схема возможных переходов по событиям A_i и $\bar{A}_i, i \in \{1, 3, 4\}$, с указанием временных интервалов, соответствующих этим событиям.

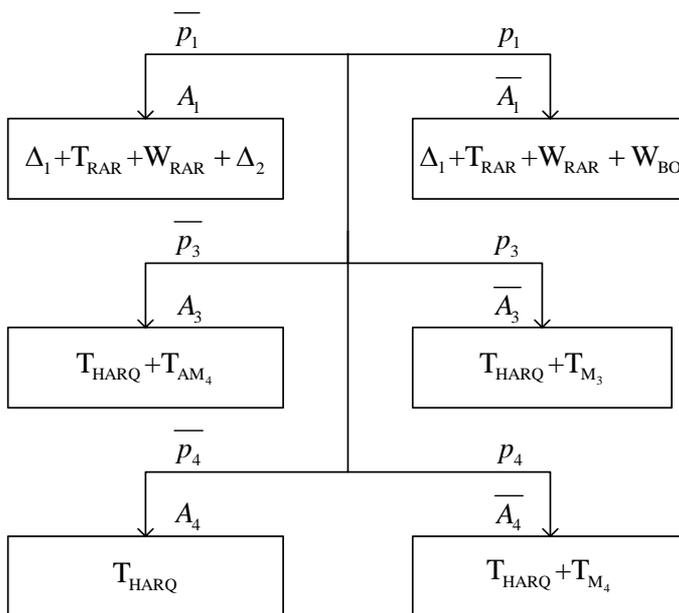


Рис. 2. Схема переходов

Введём марковскую цепь с дискретным временем $\{\xi_i, i = 0, \dots, (N_1 + 1)(N_3 + 1)(N_4 + 1)\}$ и пространством состояний

$$\begin{aligned}
 \mathcal{X} = \{X, n_i = \bar{0}, \bar{N}_i, 0 \leq m_1 \leq n_1, 0 \leq m_i \leq 1, i = \{3; 4\}, 0 \leq k_{1j} \leq m_1, \\
 k_1 \in \{0, 1\}, j = \{3; 4\}, k_{13} + k_{14} + k_1 = m_1, k_{14} \leq l_3 \leq k_{14} \cdot N_3, \},
 \end{aligned}$$

где для краткости обозначено

$$X := \begin{pmatrix} n_1, m_1, k_{13}, k_{14}, k_1 \\ n_3, m_3, l_3 \\ n_4, m_4 \end{pmatrix}.$$

Для описания марковской цепи использованы следующие обозначения: n_1 — общее число переданных сообщений Msg1; m_1 — число успешно переданных сообщений Msg1; k_{13} — число успешно переданных сообщений Msg1, после которых соединение не установилось из-за блокировки сообщения Msg3 по причине достижения порога

N_3 ; k_{14} — число успешно переданных сообщений Msg1, после которых соединение не установилось из-за блокировки сообщения Msg4 по причине достижения порога N_4 ; k_1 — индикатор, показывающий текущее состояние последнего переданного сообщения Msg1 (при успешной последней передаче равно 1, при коллизии — 0); n_3 — общее число переданных сообщений Msg3 при последнем успешно переданном сообщении Msg1; m_3 — число успешно переданных Msg3 при последнем успешно переданном сообщении Msg1; l_3 — число переданных сообщений Msg3 (успешных и неуспешных), после которых заблокированы сообщения Msg4 по причине достижения порога N_4 ; n_4 — общее число переданных сообщений Msg4 при последнем успешно переданном сообщении Msg3; m_4 — число успешно переданных сообщений Msg4 при последнем успешно переданном сообщении Msg3.

Поскольку время установления соединения определяется как интервал времени от момента первой передачи преамбулы до момента успешно полученного Msg4, получим выражение (1) для расчёта вероятности P_X попадания в состояние X из начального состояния $\begin{pmatrix} 0, 0, 0, 0, 0 \\ 0, 0, 0 \\ 0, 0 \end{pmatrix}$:

$$P_X = p_1^{n_1 - m_1} (1 - p_1)^{m_1} p_3^{N_3 k_{13} + l_3 - k_{14} + n_3 - m_3} (1 - p_3)^{k_{14} + m_3} p_4^{N_4 k_{14} + n_4 - m_4} \times \\ \times (1 - p_4)^{m_4} C_{n_1 - 1}^{k_{13} + k_{14}} C_{k_{13} + k_{14}}^{k_{13}} \left(\sum_{i=0}^{\lfloor \frac{l_3 - k_{14}}{N_3} \rfloor} (-1)^i C_{k_{14}}^i C_{l_3 - i N_3 - 1}^{k_{14} - 1} \right)^{u(k_{14} - 1)}, \quad (1)$$

где $u(k_{14} - 1) = \begin{cases} 0, & k_{14} - 1 \leq 0 \\ 1, & k_{14} - 1 > 0 \end{cases}$ — функция Хевисайда.

Первый множитель $p_1^{n_1 - m_1}$ соответствует $n_1 - m_1$ коллизиям сообщения Msg1; множитель $(1 - p_1)^{m_1}$ — m_1 успешным передачам сообщений Msg1; множитель $p_3^{N_3 k_{13} + l_3 - k_{14} + n_3 - m_3}$ — всем неуспешным передачам Msg3; множитель $(1 - p_3)^{k_{14} + m_3}$ — всем успешным передачам Msg3; множитель $p_4^{N_4 k_{14} + n_4 - m_4}$ — всем неуспешным передачам Msg4; множитель $(1 - p_4)^{m_4}$ соответствует всем успешным передачам Msg4; биномиальные коэффициенты $C_{n_1 - 1}^{k_{13} + k_{14}}$, $C_{k_{13} + k_{14}}^{k_{13}}$, и $\left(\sum_{i=0}^{\lfloor \frac{l_3 - k_{14}}{N_3} \rfloor} (-1)^i C_{k_{14}}^i C_{l_3 - i N_3 - 1}^{k_{14} - 1} \right)^{u(k_{14} - 1)}$ отражают число возможных путей, приводящих к состоянию X . При этом последний из коэффициентов необходим только при $N_1 \geq 3$.

Обозначим пространство состояний успеха $\mathcal{X}_{\text{success}} = \{X : k_1 = m_3 = m_4 = 1\}$, а пространство состояний неудачи $\mathcal{X}_{\text{fail}} = \{X : n_1 = N_1, n_4 = N_4, m_4 = 0\}$.

Вероятности успешного P_{success} и неуспешного P_{fail} соединения вычисляются по формулам:

$$P_{\text{success}} = \sum_{X \in \mathcal{X}_{\text{success}}} P_X, \quad P_{\text{fail}} = \sum_{X \in \mathcal{X}_{\text{fail}}} P_X. \quad (2)$$

Для граничных условий $N_1 = N_3 = N_4 = 2$ формулы (2) могут быть получены в явном виде (3) и (4).

$$P_{\text{success}} = (1 - p_1)(1 - p_3^2)(1 - p_4^2) [2 - (1 - p_1)(1 - p_3^2)(1 - p_4^2)], \quad (3)$$

$$P_{\text{fail}} = [1 - (1 - p_1)(1 - p_3^2)(1 - p_4^2)]^2. \quad (4)$$

Заметим, что сумма вероятностей P_{success} и P_{fail} равна 1.

Время D_X установления соединения для состояния X соответствует сумме временных интервалов, участвующих в процедуре, и представлено формулой (5):

$$\begin{aligned}
 D_X = & k_{13} (\Delta_1 + T_{\text{RAR}} + W_{\text{RAR}} + \Delta_2) + \\
 & + k_{13} (N_3 (\Delta_1 + T_{\text{RAR}} + W_{\text{RAR}} + W_{\text{BO}})) + k_{14} (\Delta_1 + T_{\text{RAR}} + W_{\text{RAR}} + \Delta_2 + T_{\text{HARQ}}) + \\
 & + k_{14} (T_{\text{AM}_4} + N_4 (T_{\text{HARQ}} + T_{M_4})) + (l_3 - k_{14}) (T_{\text{HARQ}} + T_{M_3}) + \\
 & + k_1 (\Delta_1 + T_{\text{RAR}} + W_{\text{RAR}} + \Delta_2) + (n_1 - m_1) (\Delta_1 + T_{\text{RAR}} + W_{\text{RAR}} + W_{\text{BO}}) + \\
 & + m_3 (T_{\text{HARQ}} + T_{\text{AM}_4}) + (n_3 - m_3) (T_{\text{HARQ}} + T_{M_3}) + m_4 T_{\text{HARQ}} + \\
 & + (n_4 - m_4) (T_{\text{HARQ}} + T_{M_4}). \quad (5)
 \end{aligned}$$

Среднее время успешного установления соединения D определяется по формуле (6):

$$D = \frac{\sum_{X \in \mathcal{X}_{\text{success}}} P_X \cdot D_X}{P_{\text{success}}}. \quad (6)$$

4. Численный эксперимент

Для анализа вероятностно-временных характеристик рассмотрим одну соту сети LTE, поддерживающую обслуживание M2M-устройств, и используем данные табл. 1 [2, 4–7, 9].

Таблица 1

Исходные параметры

Параметры	Обозначение	Значение
Максимальное число коллизий преамбулы	N_1	2/4/10
Максимальное число ретрансляций сообщений Msg3	N_3	2/2/5
Максимальное число ретрансляций сообщений Msg4	N_4	2/2/5
Вероятность коллизии преамбулы (Msg1)	p_1	[0;1]
Вероятность неуспешной передачи сообщения Msg3 [7]	p_3	0,1
Вероятность неуспешной передачи сообщения Msg4 [7]	p_4	0,1
Время синхронизации до передачи Msg1	Δ_1	5 мс
Время обнаружения преамбулы [7]	T_{RAR}	2 мс
Время отклика (Backoff window) [3]	W_{BO}	21 мс
Backoff индикатор (Backoff Indicator, BI) [3]	BI	20 мс
Временной интервал для ответа Msg2 [7]	W_{RAR}	5 мс
Временной интервал после успешной передачи Msg2 до отправки Msg3 [7]	Δ_2	2 мс

Таблица 1

Исходные параметры (продолжение таблицы)

Параметры	Обозначение	Значение
Временной интервал, необходимый для приёма сообщения HARQ ACK [7]	T_{HARQ}	4 мс
Временной интервал перед передачей сообщения Msg4 [7]	T_{AM_4}	1 мс
Временной интервал перед повторной передачей сообщения Msg3 [7]	T_{M_3}	1 мс
Временной интервал перед повторной передачей сообщения Msg4 [7]	T_{M_4}	1 мс

Граничные условия по количеству ретрансляций существенно влияют на параметры пространства состояний марковской цепи $\{\xi_i\}$. Для численного эксперимента выбраны три частных случая (табл. 2), для которых показано изменение размерности пространств состояний.

Таблица 2

Размерность пространств состояний

	Граничные условия	$ \mathcal{X} $	$ \mathcal{X}_{\text{success}} $	$ \mathcal{X}_{\text{fail}} $
1	$N_1 = N_3 = N_4 = 2$	36	20	16
2	$N_1 = 4, N_3 = N_4 = 2$	220	140	80
3	$N_1 = 10, N_3 = N_4 = 5$	60005	55000	5005

На рис. 3 показана зависимость вероятности успешного и неуспешного соединения для граничных условий $N_1 = N_3 = N_4 = 2$ от вероятности коллизии Msg1 при фиксированных вероятностях ретрансляции Msg3 и Msg 4 ($p_3 = p_4 = 0, 1$). Заметим, что при увеличении граничных условий до рекомендованных в стандарте [2] значений вероятность успешного установления соединения увеличивается. Этот факт легко объясняется физическим смыслом процедуры, так как при каждой последующей ретрансляции преамбулы инициализируется новый счётчик количества ретрансляций сообщений Msg3 и Msg4, что увеличивает вероятность успешного установления соединения.

На рис. 4 показана зависимость среднего времени установления соединения от вероятности коллизии Msg1 для различных граничных условий и значения Backoff Indicator BI=20 мс [3]. С увеличением количества повторных передач преамбулы и HARQ-сообщений значительно растёт продолжительность среднего времени установления соединения. Так при граничных условиях $N_1 = N_3 = N_4 = 2$ максимальное среднее время составляет 38,6 мс, а при $N_1 = 10, N_3 = N_4 = 5$ возрастает в более чем 4 раза и достигает 172,3 мс.

5. Заключение

Основные результаты, полученные в рамках данного исследования, в частности анализ вероятности успешного и неуспешного установления соединения, могут быть применены, например, в концепциях смарт-парковок в городах-мегаполисах.

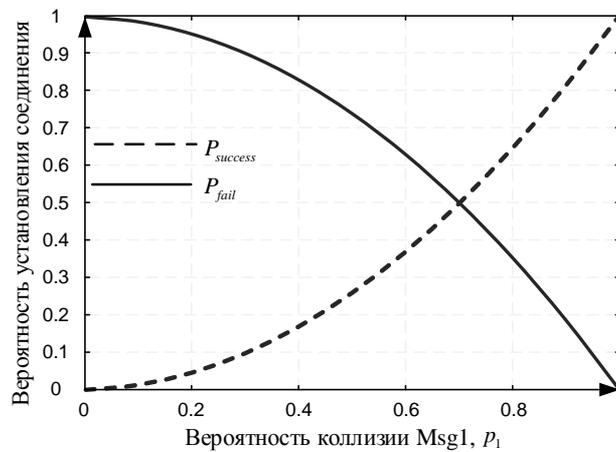


Рис. 3. Вероятность успешного и неуспешного установления соединения для граничных условий $N_1 = N_3 = N_4 = 2$

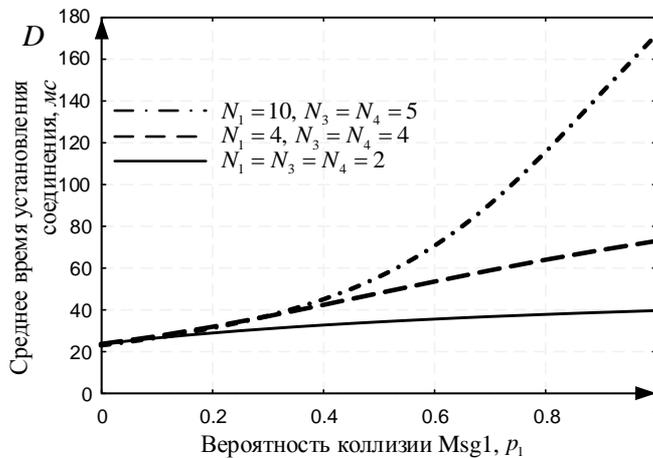


Рис. 4. Среднее время установления соединения

Среднее время установления соединения для передачи данных от датчиков имеет важное значение при выполнении технических условий: информация о состоянии парковочных мест должна быть предоставлена водителю в режиме реального времени.

Одной из задач дальнейших исследований является построение процедуры установления соединений, основываясь на представленной математической модели, с использованием процедуры I-RA (Improved Random Access) с D2D-RA-устройствами (Device-to-Device), которые объединяют информацию от расположенных вблизи M2M-устройств с целью её дальнейшей передачи на базовую станцию. Другой задачей можно назвать применение процедуры запрета классов вызовов ACB (Access Class Baring), для которой можно использовать в качестве основы изученную в представленной статье процедуру установления соединения по радиоканалу случайного доступа.

Литература

1. 3GPP. — 3GPP LTE Release 10 & Beyond (LTE-Advanced), MTC Enhancements.
2. 3GPP, 2011. — Study on RAN Improvements for Machine-Type Communications. Release 11.
3. Analyzing the Overload of 3GPP LTE System by Diverse Classes of Connected-Mode MTC Devices / O. Dementev, O. Galinina, M. Gerasimenko et al. // IEEE World Forum on Internet of Things. — IEEE, 2014. — Pp. 309–312. — DOI: 10.1109/WF-IoT.2014.6803178.
4. Baseline Analytical Model for Machine-Type Communications over 3GPP RACH in LTE-Advanced Networks / K. E. Samouylov, Y. V. Gaidamaka, I. A. Gudkova et al. // Computer and Information Sciences. ISCIS 2016. Communications in Computer and Information Science. — Springer, Cham, 2016. — Vol. 659. — Pp. 203–213. — DOI: 10.1007/978-3-319-47217-1_22.
5. Modelling a Random Access Channel with Collisions for M2M Traffic in LTE Networks / V. Borodakiy, K. Samouylov, Y. Gaidamaka et al. // Internet of Things, Smart Spaces, and Next Generation Networks and Systems. NEW2AN 2014. Lecture Notes in Computer Science / Ed. by S. Balandin, S. Andreev, Y. Koucheryavy. — Springer, Cham, 2014. — Vol. 8638. — Pp. 301–310. — DOI: 10.1007/978-3-319-10353-2_26.
6. RACH Collision Probability for Machine-Type Communications / R.-G. Cheng, C.-H. Wei, S.-L. Tsao, F.-C. Ren // IEEE 75th Vehicular Technology Conference (VTC Spring). — IEEE, 2012. — Pp. 1–5. — DOI: 10.1109/VETECS.2012.6240129.
7. *Wei C.-H., Bianchi G., Cheng R.-G.* Modelling and Analysis of Random Access Channels with Bursty Arrivals in OFDMA Wireless Networks // IEEE Trans. on Wireless Communication. — 2015. — Vol. 14, issue 4. — Pp. 1940–1953. — DOI: 10.1109/TWC.2014.2377121.
8. Virtual Code Resource Allocation for Energy-Aware MTC Access over 5G Systems / M. Condoluci, G. Araniti, M. Dohler et al. // Ad Hoc Networks. — 2016. — Vol. 43. — Pp. 3–15. — DOI: 10.1016/j.adhoc.2016.02.006.
9. *Зарипова Э. Р., Ардила Пинто А.* Метод оценки времени установления соединения по радиоканалу случайного доступа // Вестник РУДН. Серия: Математика. Информатика. Физика. — 2017. — Т. 25, № 1. — С. 9–18. — DOI: 10.22363/2312-9735-2017-25-1-9-18.
10. 3GPP, 2010. — Evolved Universal Terrestrial Radio Access (E-UTRA) Medium Access Control (MAC) Protocol Specification. Release 9.3.0.

UDC 621.39

DOI: 10.22363/2312-9735-2018-26-3-261-271

RACH Session Initiation Procedure with Retranslations

O. V. Semenova*, **A. S. Vlaskina***, **E. G. Medvedeva***, **E. R. Zaripova***,
I. A. Gudkova*[†]

** Department of Applied Probability and Informatics
Peoples' Friendship University of Russia (RUDN University)
6, Miklukho-Maklaya str., Moscow, 117198, Russian Federation*

*[†] Institute of Informatics Problems
Federal Research Center "Computer Science and Control" of the Russian Academy of Sciences
44-2 Vavilov str., Moscow, 119333, Russian Federation*

Due to the rapidly growing number of user's equipments, operating in the LTE (Long-Term Evolution) mobile radio network, it became necessary to find methods to reduce the user load and signaling message's traffic. New rules and procedures of devices communication are created to downsize network resources. This article explores the procedure for establishing a connection between mobile user's equipment and the LTE base station. Such possible solution of transferring

small data generated by machine-to-machine connections (M2M, Machine-to-Machine) was presented in the technical report TR 37.868 of the 3GPP consortium (3rd Generation Partnership Project). This approach implies the use of the random access channel (RACH) to interconnect between devices. Effective usage of the procedure for establishing a connection through a random access radio channel is based on the analysis of time-probability characteristics, such as the access success probability and failed access probability, average access delay. In this article we proposed analytical model in term of Markov chain to find these characteristics and present numerical analysis, considering collisions of preamble message, retransmissions of signalling messages and the boundary conditions on the number of possible retransmissions. The accuracy of the proposed analytical model was verified using programming environment R.

Key words and phrases: LTE-advance, machine-type communications, random access channel, collision, access success probability, average access delay

References

1. 3GPP, 3GPP LTE Release 10 & beyond (LTE-Advanced), MTC Enhancements.
2. 3GPP, Study on RAN Improvements for Machine-Type Communications. Release 11. (Sept 2011).
3. O. Dementev, O. Galinina, M. Gerasimenko, T. Tirronen, J. Torsner, S. Andreev, Y. Koucheryavy, Analyzing the Overload of 3GPP LTE System by Diverse Classes of Connected-Mode MTC Devices, in: IEEE World Forum on Internet of Things, IEEE, 2014, pp. 309–312. doi:10.1109/WF-IoT.2014.6803178.
4. K. E. Samouylov, Y. V. Gaidamaka, I. A. Gudkova, E. R. Zaripova, S. Y. Shorgin, Baseline Analytical Model for Machine-Type Communications over 3GPP RACH in LTE-Advanced Networks, Vol. 659, Springer, Cham, 2016, pp. 203–213. doi:10.1007/978-3-319-47217-1_22.
5. V. Borodakiy, K. Samouylov, Y. Gaidamaka, P. Abaev, I. Buturlin, S. Etezov, Modelling a Random Access Channel with Collisions for M2M Traffic in LTE Networks, Vol. 8638, Springer, Cham, 2014, pp. 301–310. doi:10.1007/978-3-319-10353-2_26.
6. R.-G. Cheng, C.-H. Wei, S.-L. Tsao, F.-C. Ren, RACH Collision Probability for Machine-Type Communications, IEEE, 2012, pp. 1–5. doi:10.1109/VETECS.2012.6240129.
7. C.-H. Wei, G. Bianchi, R.-G. Cheng, Modelling and Analysis of Random Access Channels with Bursty Arrivals in OFDMA Wireless Networks, IEEE Trans. on Wireless Communication 14 (2015) 1940–1953. doi:10.1109/TWC.2014.2377121.
8. M. Condoluci, G. Araniti, M. Dohler, A. Iera, A. Molinaro, Virtual Code Resource Allocation for Energy-Aware MTC Access over 5G Systems, Ad Hoc Networks 43 (2016) 3–15. doi:10.1016/j.adhoc.2016.02.006.
9. E. R. Zaripova, A. Ardila Pinto, Performance and Modeling of Session Setup Procedure Using Random Access Channel, RUDN Journal of Mathematics, Information Sciences and Physics 25 (1) (2017) 9–18, in Russian. doi:10.22363/2312-9735-2017-25-1-9-18.
10. 3GPP, Evolved Universal Terrestrial Radio Access (E-UTRA) Medium Access Control (MAC) Protocol Specification. Release 9.3.0. (Jun 2010).

© Семенова О. В., Власкина А. С., Медведева Е. Г., Зарипова Э. Р., Гудкова И. А., 2018

Для цитирования:

Семенова О. В., Власкина А. С., Медведева Е. Г., Зарипова Э. Р., Гудкова И. А. Процедура установления соединения по радиоканалу случайного доступа с возможностью ретрансляции // Вестник Российского университета дружбы народов. Серия: Математика. Информатика. Физика. — 2018. — Т. 26, № 3. — С. 261–271. — DOI: 10.22363/2312-9735-2018-26-3-261-271.

For citation:

Semenova O. V., Vlaskina A. S., Medvedeva E. G., Zaripova E. R., Gudkova I. A. RACH Session Initiation Procedure with Retranslations, RUDN Journal of Mathematics, Information Sciences and Physics 26 (3) (2018) 261–271. DOI: 10.22363/2312-9735-2018-26-3-261-271. In Russian.

Сведения об авторах:

Семенова Оксана Владимировна — студент кафедры прикладной информатики и теории вероятностей РУДН (e-mail: 1032163670@rudn.university, тел.: +7 (495) 9522823)

Власкина Анастасия Сергеевна — студент кафедры прикладной информатики и теории вероятностей РУДН (e-mail: 1032163669@rudn.university, тел.: +7 (495) 9522823)

Медведева Екатерина Георгиевна — ассистент кафедры прикладной информатики и теории вероятностей РУДН (e-mail: medvedeva_eg@rudn.university, тел.: +7 (495) 9550999)

Зарипова Эльвира Ринатовна — кандидат физико-математических наук, доцент кафедры прикладной информатики и теории вероятностей РУДН (e-mail: zaripova_er@rudn.university, тел.: +7 (495) 9550999)

Гудкова Ирина Андреевна — доцент, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры прикладной информатики и теории вероятностей РУДН (e-mail: gudkova_ia@rudn.university, тел.: +7(495)9522823)

Information about the authors:

Semenova O. V. — Student of Department of Applied Probability and Informatics of Peoples' Friendship University of Russia (RUDN University) (e-mail: 1032163670@rudn.university, phone: +7 (495) 9522823)

Vlaskina A. S. — Student of Department of Applied Probability and Informatics of Peoples' Friendship University of Russia (RUDN University) (e-mail: 1032163669@rudn.university, phone: +7 (495) 9522823)

Medvedeva E. G. — Assistant of Department of Applied Probability and Informatics of Peoples' Friendship University of Russia (RUDN University) (e-mail: medvedeva_eg@rudn.university, phone: +7 (495) 9550999)

Zaripova E. R. — Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Assistant Professor of Department of Applied Probability and Informatics of Peoples' Friendship University of Russia (RUDN University) (e-mail: zaripova_er@rudn.university, phone: +7 (495) 9550999)

Gudkova I. A. — Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor of Department of Applied Probability and Informatics of Peoples' Friendship University of Russia (RUDN University) (e-mail: gudkova_ia@rudn.university, phone: +7(495)9522823)



УДК 004.021:519.2:519.6

DOI: 10.22363/2312-9735-2018-26-3-272-284

Параметрическое исследование системы с модулем активного управления трафиком

Т. Р. Велиева

*Кафедра прикладной информатики и теории вероятностей
Российский университет дружбы народов
ул. Миклухо-Маклая, д. 6, Москва, Россия, 117198*

Автоколебательные режимы в системах управления в сетях передачи данных крайне негативно влияют на характеристики этих сетей. Актуальной является проблема нахождения зон возникновения автоколебаний, а также исследование параметров автоколебаний. Данные исследования крайне трудоёмки из-за существенной нелинейности математической модели. Представляет интерес получение так называемого параметрического портрета, описывающего зоны возникновения автоколебаний в зависимости от значения параметров: одного (двумерный график), двух (трёхмерный график) и так далее. Подобный параметрический портрет позволяет целенаправленно управлять характеристиками исследуемой системы с управлением. Исследование рассматриваемой системы на основе обычной линеаризации путём разложения в ряд Тейлора не представляется возможным из-за исчезновения собственно автоколебательного режима. Поэтому в работе описывается методика параметрического исследования на основе метода гармонической линеаризации. Для верификации полученных теоретических результатов предлагается использовать имитационное моделирование. Кроме того, в работе предлагается использовать для аналитических расчётов систему компьютерной алгебры. Для этого были сформулированы критерии по выбору программного обеспечения. На основе этих критериев был предложен конкретный набор программного обеспечения для аналитических и численных расчётов.

Ключевые слова: активное управление трафиком, имитационное моделирование, NS2, Julia, SymPy, автоколебательный режим

1. Введение

В компьютерных сетях, в которых основным транспортным протоколом выступает протокол TCP [1], большой интерес представляет изучение характеристик технических систем управления трафиком, в частности, маршрутизаторов с модулем активного управления очередью поступающего в него потока данных. В качестве алгоритма активного управления очередью в таких системах обычно выступает один из алгоритмов типа RED (Random Early Detection) [2, 3].

Алгоритм RED [2] использует экспоненциально взвешенное скользящее среднее значение длины очереди \hat{Q} в качестве фактора, определяющего вероятность отбрасывания пакета $p(\hat{Q})$:

$$p(\hat{Q}) = \begin{cases} 0, & 0 < \hat{Q} \leq Q_{\min}, \\ \frac{\hat{Q} - Q_{\min}}{Q_{\max} - Q_{\min}} p_{\max}, & Q_{\min} < \hat{Q} \leq Q_{\max}, \\ 1, & \hat{Q} > Q_{\max}. \end{cases} \quad (1)$$

Здесь Q_{\min} и Q_{\max} — пороговые значения средневзвешенного значения длины очереди, p_{\max} — максимальный уровень сброса пакетов.

Статья поступила в редакцию 29 июня 2018 г.

Публикация подготовлена при поддержке Программы РУДН «5-100» и при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 16-07-00556.

По мере роста \hat{Q} растёт вероятность отбрасывания пакетов $p(\hat{Q})$ (см. (1)).

Совокупность особенностей функционирования транспортного протокола TCP и алгоритма управления приводит к возникновению автоколебательного режима таких параметров системы, как средний размер окна протокола TCP и средний размер очереди пакетов в управляющем модуле, что негативным образом сказывается на показателях качества обслуживания сети [4–6]. Причиной перехода системы в автоколебательный режим может быть неудачный выбор параметров алгоритма управления. В частности, для классического алгоритма управления RED на данный момент не предложено чётких критериев выбора пороговых значений Q_{\min} и Q_{\max} , гарантирующих отсутствие перехода системы в автоколебательный режим. Но можно попытаться выявить зоны возникновения автоколебательного режима системы и проанализировать параметры автоколебаний.

В данной работе предложено описание методики параметрического исследования модели с управлением на основе метода Крылова–Боголюбова [7], известного также как метод гармонической линеаризации [8].

В качестве математически формализованной модели системы с управлением по алгоритму RED в данной работе рассмотрена непрерывная модель, аналогичная предложенным в работах [9–14], с упрощающими предположениями: модель записана в моментах, при этом используется только фаза избежания перегрузок протокола TCP Reno и сброс пакетов при получении 3-х последовательных подтверждений ACK протокола TCP Reno:

$$\begin{cases} \dot{W}(t) = \frac{1}{T(Q, t)} - \frac{W(t)W(t - T(Q, t))}{2T(t - T(Q, t))} p(t - T(Q, t)); \\ \dot{Q}(t) = \frac{W(t)}{T(Q, t)} N(t) - C; \\ \dot{\hat{Q}}(t) = -w_q C \hat{Q}(t) + w_q C Q(t). \end{cases} \quad (2)$$

Здесь использованы следующие обозначения: W — средний размер окна протокола TCP; Q — среднее значение размера очереди; \hat{Q} — экспоненциально-взвешенное скользящее среднее (EWMA) среднего размера очереди; C — интенсивность обслуживания очереди; T — полное время двойного оборота; $T = T_p + \frac{Q}{C}$, где T_p — время двойного оборота свободной сети (без учёта задержек в оборудовании); $\frac{Q}{C}$ — время нахождения пакета в очереди; N — количество сессий TCP; p — функция сброса пакетов, w_q — весовой коэффициент, определяемый алгоритмом EWMA ($0 < w_q < 1$).

Схема исследований предложена на рис. 1.

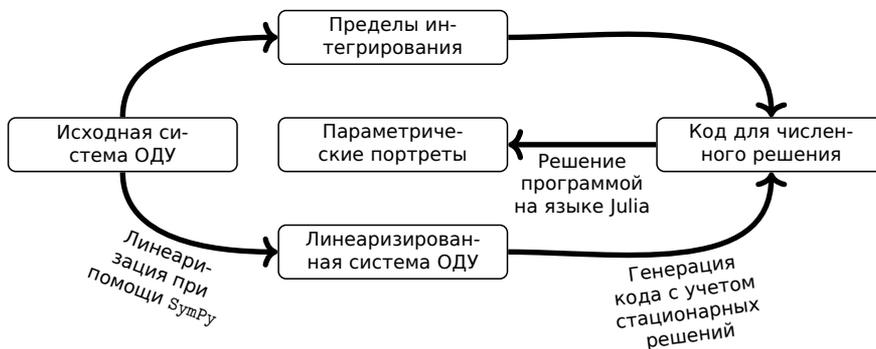


Рис. 1. План исследования

В соответствии со схемой исследований для нахождения параметров автоколебаний систему обыкновенных дифференциальных уравнений (2) необходимо сначала линеаризовать. При этом следует учесть, что при стандартной линеаризации теряется колебательная структура системы [4]. В качестве альтернативы предлагается использовать так называемый метод гармонической линеаризации, краткое описание которого приведено в разделе 2, а более подробное и в применении к системе с управлением по алгоритму RED — в работах [15–17].

При проведении гармонической линеаризации возникает целое семейство моделей. В частности, после линеаризации исходная система (2) распадается на несколько частей (см. рис. 2).

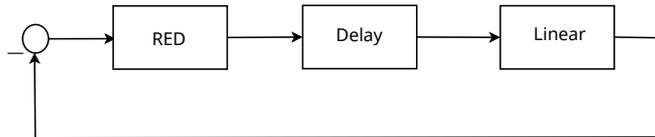


Рис. 2. Схема линеаризованной системы

В разделе 3 демонстрируется применение метода гармонической линеаризации для модели с управлением по алгоритму RED с целью получения коэффициентов гармонической линеаризации, используемых затем в системе компьютерной алгебры для получения семейства моделей с помощью пакета SymPy (см. раздел 4). В дальнейшем также с помощью системы компьютерной алгебры для каждой подмодели были получены наборы файлов на языке Julia, используя которые и задавая разные значения параметров, можно получить параметрический портрет автоколебаний (см. раздел 5). Следует заметить, что вычисления надо произвести для всех подмоделей, хотя решение будет существовать только для одной подмодели.

На заключительном этапе следует провести верификацию полученных результатов. Для этого предложено использовать систему имитационного моделирования NS2 [18] (см. раздел 6).

2. Метод гармонической линеаризации

Метод гармонической линеаризации был предложен Н. Н. Боголюбовым, Н. М. Крыловым [7] и Г. Найквистом [8]. Содержание этого метода сводится к отделению так называемых «медленных» переменных системы от «быстрых». Гармонически линеаризованная система зависит от амплитуд и частот периодических процессов. Это является существенным отличием гармонической линеаризации от обычного способа линеаризации, приводящего к чисто линейным выражениям, что позволяет исследовать основные свойства нелинейных систем.

Метод гармонической линеаризации применяется для систем определённой структуры. Система состоит из линейного H_l и нелинейного H_{nl} звеньев, заданных функцией $f(x)$. Обычно рассматривают статический нелинейный элемент.

На вход нелинейного элемента подаются свободные гармонические колебания:

$$x(t) = x_0 + \tilde{x} := x_0 + A \sin(\omega t). \quad (3)$$

На выходе нелинейного элемента H_{nl} получается периодический сигнал, который можно разложить в ряд Фурье:

$$y = \frac{a_0}{2} + \sum_{k=1}^{\infty} (a_k \sin(k\omega t) + b_k \cos(k\omega t)), \quad (4)$$

где коэффициенты ряда Фурье имеют следующий вид:

$$\begin{aligned} a_0 &= \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} f(x_0 + A \sin(\omega t)) d(\omega t); \\ a_k &= \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} f(x_0 + A \sin(\omega t)) \sin(k\omega t) d(\omega t), \quad k = \overline{1, \infty}; \\ b_k &= \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} f(x_0 + A \sin(\omega t)) \cos(k\omega t) d(\omega t), \quad k = \overline{1, \infty}. \end{aligned} \quad (5)$$

Линейный элемент представляет собой фильтр низких частот, то есть при увеличении k линейные элементы подавляют высшие гармоники.

Для сигнала после нелинейного элемента можно записать:

$$y = y_0 + \tilde{y} \approx \varkappa_0(A, \omega, x_0) + [\varkappa(A, \omega, x_0) + i\varkappa'(A, \omega, x_0)]\tilde{x}, \quad (6)$$

где \varkappa_0 — постоянная составляющая, \varkappa и \varkappa' — коэффициенты гармонической линеаризации:

$$\begin{aligned} \varkappa_0(A, \omega, x_0) &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} f(x_0 + A \sin(\omega t)) d(\omega t); \\ \varkappa(A, \omega, x_0) &= \frac{a_1}{A} = \frac{1}{A\pi} \int_0^{2\pi} f(x_0 + A \sin(\omega t)) \sin(\omega t) d(\omega t); \\ \varkappa'(A, \omega, x_0) &= \frac{b_1}{A} = \frac{1}{A\pi} \int_0^{2\pi} f(x_0 + A \sin(\omega t)) \cos(\omega t) d(\omega t). \end{aligned} \quad (7)$$

В дополнение к (6) записав

$$z = z_0 + \tilde{z} = (y_0 + \tilde{y})H_l(\omega), \quad x = x_0 + \tilde{x} = g(\omega) - (z_0 + \tilde{z}), \quad (8)$$

можно получить уравнение гармонической линеаризации:

$$\begin{aligned} \left[x_0 + H_l(\omega) \Big|_{\omega=0} \varkappa_0(A, \omega, x_0) \right] + \\ + [1 + H_l(\varkappa(A, \omega, x_0) + i\varkappa'(A, \omega, x_0))] \tilde{x} = g(\omega) := g_0(\omega) + \tilde{g}(\omega), \end{aligned} \quad (9)$$

которое можно разделить на постоянную и гармоническую составляющие:

$$\begin{aligned} \left[x_0 + H_l(\omega) \Big|_{\omega=0} \varkappa_0(A, \omega, x_0) \right] = g_0(\omega), \\ [1 + H_l(\varkappa(A, \omega, x_0) + i\varkappa'(A, \omega, x_0))] \tilde{x} = \tilde{g}(\omega). \end{aligned} \quad (10)$$

При изучении автоколебательного режима предполагается, что внешний сигнал отсутствует ($g = 0$).

3. Гармоническая линейризация модели с управлением по алгоритму RED

В работах [15–17] проведена линейризация модели с управлением по алгоритму RED и получено следующее выражение для функции H_l :

$$H_l(\omega) = - \frac{C^4 T_f^3 w_q}{2N(Cw_q + i\omega)(iT_f\omega + 1)(iCT_f^2\omega - iNT_f\omega + 2N)}. \quad (11)$$

Линеаризованная функция сброса P_{RED} имеет вид, приведённый на рис. 3.

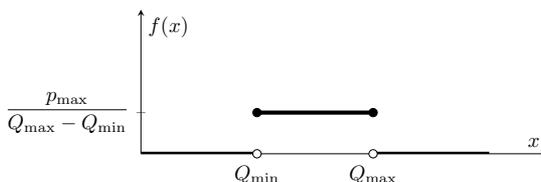


Рис. 3. Линеаризованная функция сброса P_{RED}

Вычислим коэффициенты гармонической линейризации $\varkappa_0(A, \omega, x_0)$, $\varkappa(A, \omega, x_0)$ и $\varkappa'(A, \omega, x_0)$ (7) для статической нелинейности P_{RED} :

$$\begin{aligned} \varkappa_0(A, \omega, x_0) &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} P_{\text{RED}}(x_0 + A \sin(\omega t)) d(\omega t); \\ \varkappa(A, \omega, x_0) &= \frac{1}{A\pi} \int_0^{2\pi} P_{\text{RED}}(x_0 + A \sin(\omega t)) \sin(\omega t) d(\omega t); \\ \varkappa'(A, \omega, x_0) &= \frac{1}{A\pi} \int_0^{2\pi} P_{\text{RED}}(x_0 + A \sin(\omega t)) \cos(\omega t) d(\omega t). \end{aligned} \quad (12)$$

В зависимости от соотношений между порогами Q_{\min} , Q_{\max} , сдвигом x_0 и амплитудой A возможно получить разные пределы интегрирования. Приведём несколько примеров графического метода нахождения пределов интегрирования (см. рис. 4) в зависимости от соотношений между постоянным сдвигом x_0 , амплитудой A , порогами Q_{\min} и Q_{\max} .

Для примера рассмотрим случай, когда $Q_{\min} < x_0 < Q_{\max}$, $x_0 - A > Q_{\min}$, $x_0 + A > Q_{\max}$. Тогда получим:

$$\begin{aligned} \varkappa_0(A, x_0) &= \frac{1}{2\pi} \frac{p_{\max}}{Q_{\max} - Q_{\min}} \int_0^{\alpha_{\max}} d(\omega t) + \int_{\pi - \alpha_{\max}}^{2\pi} d(\omega t) = \\ &= \frac{1}{2\pi} \frac{p_{\max}}{Q_{\max} - Q_{\min}} [2\alpha_{\max} + \pi]; \end{aligned} \quad (13)$$

$$\begin{aligned} \varkappa(A, x_0) &= \frac{1}{A\pi} \frac{p_{\max}}{Q_{\max} - Q_{\min}} \left[\int_0^{\alpha_{\max}} \sin(\omega t) d(\omega t) + \int_{\pi - \alpha_{\max}}^{2\pi} \sin(\omega t) d(\omega t) \right] = \\ &= \frac{1}{A\pi} \frac{p_{\max}}{Q_{\max} - Q_{\min}} \left[(-\cos(\omega t)) \Big|_0^{\alpha_{\max}} + (-\cos(\omega t)) \Big|_{\pi - \alpha_{\max}}^{2\pi} \right]; \end{aligned} \quad (14)$$

$$\begin{aligned} \varkappa'(A, x_0) &= \frac{1}{A\pi} \frac{p_{\max}}{Q_{\max} - Q_{\min}} \left[\int_0^{\alpha_{\max}} \cos(\omega t) d(\omega t) + \int_{\pi - \alpha_{\max}}^{2\pi} \cos(\omega t) d(\omega t) \right] = \\ &= \frac{1}{A\pi} \frac{p_{\max}}{Q_{\max} - Q_{\min}} \left[\sin(\omega t) \Big|_0^{\alpha_{\max}} + \sin(\omega t) \Big|_{\pi - \alpha_{\max}}^{2\pi} \right]. \end{aligned} \quad (15)$$

Найдём значения пределов интегрирования:

$$x_0 + A \sin \alpha_{\max} = Q_{\max}, \quad \sin \alpha_{\max} = \frac{Q_{\max} - x_0}{A}; \quad \cos \alpha_{\max} = \sqrt{1 - \frac{(Q_{\max} - x_0)^2}{A^2}}. \quad (16)$$

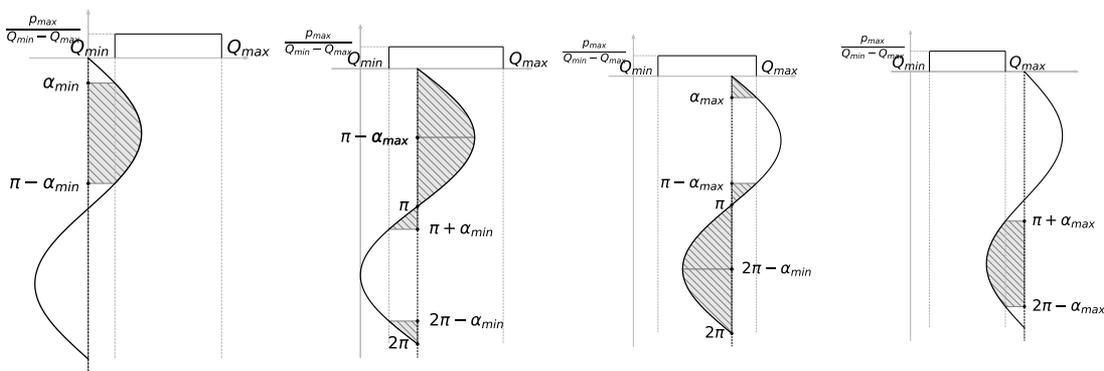


Рис. 4. Границы интегрирования

Таким образом, из (13)–(15) с учётом (16) получим:

$$\begin{aligned} \varkappa_0(A, x_0) &= \frac{p_{\max}}{2\pi(Q_{\max} - Q_{\min})} \left[2 \operatorname{asin} \left(\frac{Q_{\max} - x_0}{A} \right) + \pi \right]; \\ \varkappa(A, x_0) &= -\frac{2p_{\max}}{\pi A(Q_{\max} - Q_{\min})} \sqrt{1 - \frac{(Q_{\max} - x_0)^2}{A^2}}; \\ \varkappa'(A, x_0) &= 0. \end{aligned} \quad (17)$$

Полученные коэффициенты гармонической линеаризации в дальнейшем можно использовать для генерации кода программы с помощью системы компьютерной алгебры.

4. О программной реализации модели с управлением по алгоритму RED

Программная реализация модели с управлением по алгоритму RED проводилась в два этапа. На первом этапе была задействована система компьютерной алгебры с пакетом SymPy. С помощью этой системы проведена вся трудоёмкая обработка полученных формул. Затем результирующие выражения были использованы как для генерации программ численных расчётов, так и при переносе формул в текст научных работ.

Наиболее подходящей для поставленных в этой работе задач системой символьных вычислений является SymPy [19]. SymPy подходит нам по следующим причинам:

- в качестве интерактивной оболочки удобно использовать блокнот Jupyter, являющийся компонентом системы iPython [20], реализующей идеологию REPL;
- язык Python фактически используется как соединительный язык, своего рода язык-клей, который позволяет интегрировать между собой разные программные продукты; кроме того, в рамках библиотеки SciPy [21] поддерживается большое число выходных форматов;
- выходные данные SymPy возможно естественным образом передать для численных расчётов в библиотеку NumPy [22] и разные языки программирования.

В качестве языка для вычислений был выбран язык Julia [23]. Этот язык имеет ряд интересных особенностей, в частности он позиционируется как современная реинкарнация языка FORTRAN. Он поддерживает одновременно и этап прототипирования, и написание конечной версии программы.

Фрагменты разработанного программного кода для расчёта нелинейной передаточной функции H_{nl} , выделения её действительной и мнимой частей, перехода после линеаризации исходной модели к H_l , а также перехода к программному коду на языке Julia для последующих численных расчётов приведены в работе [24].

5. Параметрическое исследование системы на возникновение автоколебаний

В качестве иллюстрации определения зоны возникновения автоколебаний приведём конкретный пример. Зададим следующие параметры для модели с управлением по алгоритму RED: количество сессий TCP $N = 60$, время двойного оборота $T_p = 0,5$ с, значения порогов $Q_{\min} = 75$ пакетов и $Q_{\max} = 150$ пакетов, максимальный уровень сброса $p_{\max} = 0,1$, вестовой коэффициент EWMA $w_q = 0,002$. Построив параметрический портрет (см. рис. 5), получим, что точкой перехода в автоколебательный режим является значение интенсивности обслуживания $C_a = 15$ Mbps, т.е. при $C \geq C_a$ система будет находиться в автоколебательном режиме.

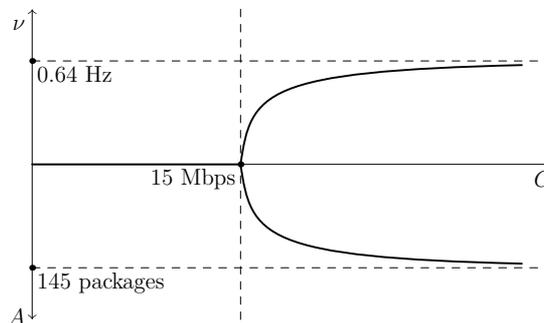


Рис. 5. Параметрический портрет

6. Верификация результатов

Использование натурального эксперимента сопряжено определёнными трудностями. Реальное оборудование не всегда бывает в наличии. Использование виртуального стенда связано с высокими требованиями к компьютерному оборудованию [12]. Кроме того, поскольку моделирование происходит в реальном времени, то весь процесс является крайне длительным.

Для экономии ресурсов и времени обычно используют средства имитационного моделирования. Пакет ns2 [18, 25] является средством имитационного моделирования сетевых протоколов и создавался как эталонное средство моделирования. Поэтому его зачастую используют как альтернативу натурному эксперименту.

Для имитационного эксперимента использована так называемая «гантельная» топология (см. рис. 6), в которой дополнительные сессии TCP эмитируются путём добавления дополнительных источников (см. рис. 7).

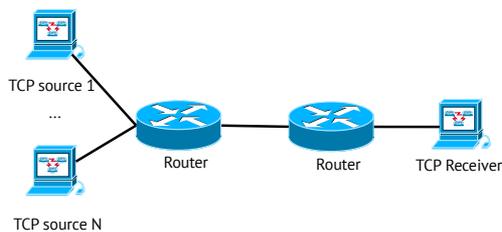


Рис. 6. Гантельная топология

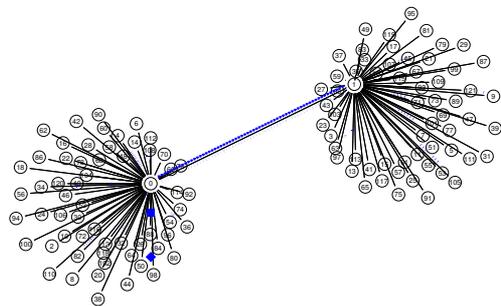


Рис. 7. Визуализация моделирования системы

Программа для ns2 пишется на языке TCL [26, 27]. Фрагменты программного кода ns2 для исследуемой модели, а также фрагменты кода на языке Julia [23], отвечающего за построение спектрального портрета автоколебательного режима на основе алгоритма быстрого преобразования Фурье [28] были представлены в работе [29].

На рис. 8 и 9 показано поведение средней длины очереди при интенсивности обслуживания $C = 5$ МБит/с и $C = 20$ МБит/с. Во втором случае явно видно наличие автоколебательного режима. Теоретически полученные характеристики этого режима: частота автоколебаний $\nu = 0.6$ Гц, амплитуда колебаний $A = 150$ пакетов.

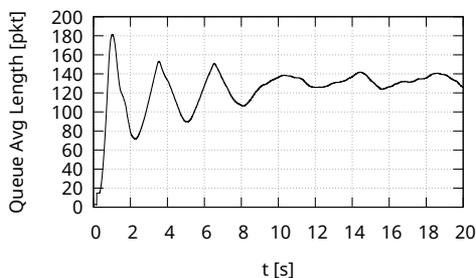


Рис. 8. Поведение средней длины очереди при интенсивности обслуживания $C = 5$ МБит/с

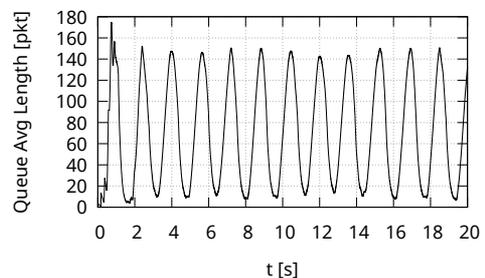


Рис. 9. Поведение средней длины очереди при интенсивности обслуживания $C = 20$ МБит/с

При спектральном исследовании результатов имитационного эксперимента получены следующие характеристики: частота автоколебаний $\nu = 0.5$ Гц, амплитуда колебаний $A = 169$ пакетов (см. рис. 10 и рис. 11). Как видно, теоретические и экспериментальные значения весьма близки.

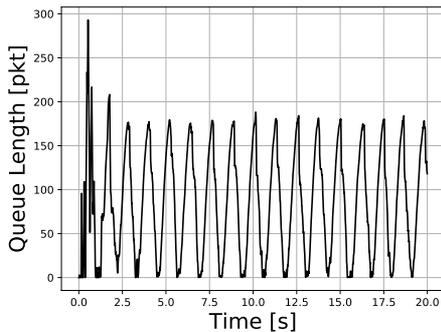


Рис. 10. Поведение мгновенной длины очереди при интенсивности обслуживания $C = 20$ МБит/с

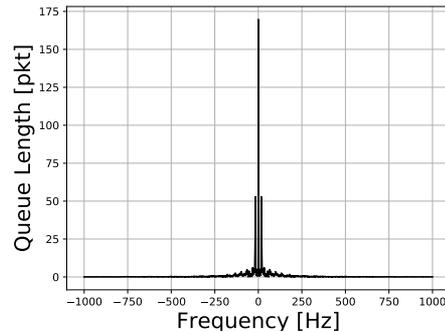


Рис. 11. Спектр автоколебаний мгновенной длины очереди при интенсивности обслуживания $C = 20$ МБит/с

Таким образом, наш программный комплекс может служить целям верификации теоретических исследований по возникновению автоколебательного режима в системах с управлением.

7. Заключение

В данной работе проведено параметрическое исследование системы с модулем активного управления трафиком по алгоритму типа RED. Предложена методика параметрического исследования модели с управлением. Для демонстрации применения методики для систем с заданными параметрами алгоритма управления разработан программный комплекс для аналитических и численных вычислений. Верификация теоретических результатов проведена в системе имитационного моделирования NS2. Показана близость теоретических и экспериментальных значений.

Литература

1. Allman M., Paxson V., Blanton E. TCP Congestion Control: Techrep. — 2009. — DOI: 10.17487/rfc5681.
2. Floyd S., Jacobson V. Random Early Detection Gateways for Congestion Avoidance // IEEE/ACM Transactions on Networking. — 1993. — Vol. 1, No 4. — Pp. 397–413. — DOI: 10.1109/90.251892.
3. Королькова А. В., Кулябов Д. С., Черноиванов А. И. К вопросу о классификации алгоритмов RED // Вестник РУДН. Серия «Математика. Информатика. Физика». — 2009. — № 3. — С. 34–46.
4. Jenkins A. Self-Oscillation // Physics Reports. — 2013. — Vol. 525, No 2. — Pp. 167–222. — DOI: 10.1016/j.physrep.2012.10.007.
5. Ren F., Lin C., Wei B. A Nonlinear Control Theoretic Analysis to TCP-RED System // Computer Networks. — 2005. — Vol. 49, No 4. — Pp. 580–592. — DOI: 10.1016/j.comnet.2005.01.016.

6. *Lautenschlaeger W., Francini A.* Global Synchronization Protection for Bandwidth Sharing TCP Flows in High-Speed Links // Proc. 16-th International Conference on High Performance Switching and Routing, IEEE HPSR 2015. — Budapest, Hungary: 2015.
7. *Крылов Н. М., Боголюбов Н. Н.* Символические методы нелинейной механики в их приложениях к исследованию резонанса в электронном генераторе // Известия Академии наук СССР. VII серия. Отделение математических и естественных наук. — 1934. — № 1. — С. 7–34.
8. *Nyquist H.* Regeneration Theory // Bell System Technical Journal. — 1932. — Vol. 11, No 1. — Pp. 126–147. — DOI: 10.1002/j.1538-7305.1932.tb02344.x.
9. *Misra V., Gong W.-B., Towsley D.* Stochastic Differential Equation Modeling and Analysis of TCP-WindowSize Behavior // Proceedings of PERFORMANCE. — 1999. — Vol. 99.
10. *Misra V., Gong W.-B., Towsley D.* Fluid-Based Analysis of a Network of AQM Routers Supporting TCP Flows with an Application to RED // ACM SIGCOMM Computer Communication Review. — 2000. — Vol. 30, No 4. — Pp. 151–160. — DOI: 10.1145/347057.347421.
11. On Designing Improved Controllers for AQM Routers Supporting TCP Flows / C. V. V. Hollot, V. Misra, D. Towsley, Wei-Bo Gong // Proceedings IEEE INFOCOM 2001. Conference on Computer Communications. Twentieth Annual Joint Conference of the IEEE Computer and Communications Society (Cat. No.01CH37213). — Vol. 3. — IEEE, 2001. — Pp. 1726–1734. — DOI: 10.1109/INFCOM.2001.916670.
12. *Velieva T. R., Korolkova A. V., Kulyabov D. S.* Designing Installations for Verification of the Model of Active Queue Management Discipline RED in the GNS3 // 6th International Congress on Ultra Modern Telecommunications and Control Systems and Workshops (ICUMT). — IEEE Computer Society, 2015. — Pp. 570–577. — DOI: 10.1109/ICUMT.2014.7002164.
13. Hybrid Simulation Of Active Traffic Management / A. V. Korolkova, T. R. Velieva, P. A. Abaev et al. // Proceedings 30th European Conference on Modelling and Simulation. — 2016. — Pp. 685–691. — DOI: 10.7148/2016-0685.
14. *Brockett R.* Stochastic Analysis for Fluid Queueing Systems // Proceedings of the 38th IEEE Conference on Decision and Control (Cat. No.99CH36304). — Vol. 3. — IEEE, 1999. — Pp. 3077–3082. — DOI: 10.1109/CDC.1999.831407.
15. The Approach to Investigation of the Regions of Self-Oscillations / T. R. Velieva, D. S. Kulyabov, A. V. Korolkova, I. S. Zaryadov // Journal of Physics: Conference Series. — 2017. — Vol. 937. — Pp. 012057_1–8. — ISSN 1742-6588. — DOI: 10.1088/1742-6596/937/1/012057.
16. *Кулябов Д. С., Королькова А. В., Велиева Т. Р.* Применение метода гармонической линеаризации к исследованию автоколебательного режима систем с управлением // Вестник РУДН. Серия: Математика. Информатика. Физика. — 2017. — Т. 25, № 3. — С. 234–252. — DOI: 10.22363/2312-9735-2017-25-3-234-252.
17. The Methodology of Studying of Active Traffic Management Module Self-oscillation Regime / D. S. Kulyabov, A. V. Korolkova, T. R. Velieva et al. // DepCoS-RELCOMEX 2017: Advances in Dependability Engineering of Complex Systems / Ed. by W. Zamojski, J. Mazurkiewicz, J. Sugier et al. — Cham: Springer International Publishing, 2018. — Vol. 582 of *Advances in Intelligent Systems and Computing*. — Pp. 215–224. — DOI: 10.1007/978-3-319-59415-6_21.
18. *Issariyakul T., Hossain E.* Introduction to Network Simulator NS2. — Boston, MA: Springer US, 2012. — P. 510. — DOI: 10.1007/978-1-4614-1406-3.
19. *Lamy R.* Instant SymPy Starter. — Packt Publishing, 2013. — 52 p.
20. *Perez F., Granger B. E.* IPython: A System for Interactive Scientific Computing // Computing in Science & Engineering. — 2007. — Vol. 9, No 3. — Pp. 21–29. — DOI: 10.1109/MCSE.2007.53.

21. *Oliphant T. E.* Python for Scientific Computing // Computing in Science & Engineering. — 2007. — Vol. 9, No 3. — Pp. 10–20. — DOI: 10.1109/MCSE.2007.58.
22. *Oliphant T. E.* Guide to NumPy. — 2 edition edition. — CreateSpace Independent Publishing Platform, 2015. — P. 364.
23. *Joshi A., Lakhanpal R.* Learning Julia. — Packt Publishing, 2017. — P. 316.
24. Software Package Development for the Active Traffic Management Module Self-Oscillation Regime Investigation / T. R. Velieva, A. V. Korolkova, A. V. Demidova, D. S. Kulyabov // DepCoS-RELCOMEX 2018: Contemporary Complex Systems and Their Dependability / Ed. by W. Zamojski, J. Mazurkiewicz, J. Sugier et al. — Cham: Springer International Publishing, 2019. — Vol. 761 of *Advances in Intelligent Systems and Computing*. — Pp. 515–525. — DOI: 10.1007/978-3-319-91446-6_48.
25. *Altman E., Jiménez T.* NS Simulator for Beginners // Synthesis Lectures on Communication Networks. — 2012. — Vol. 5, No 1. — Pp. 1–184. — DOI: 10.2200/S00397ED1V01Y201112CNT010.
26. *Welch B., Jones K.* Practical Programming in Tcl and Tk. — 4th edition. — Prentice Hall, 2003. — P. 960.
27. *Nadkarni A. P.* The Tcl Programming Language: A Comprehensive Guide. — CreateSpace Independent Publishing Platform, 2017. — P. 668.
28. *Rao K. R., Kim D. N., Hwang J. J.* Fast Fourier Transform - Algorithms and Applications. Signals and Communication Technology. — Springer, 2010. — P. 426.
29. Software Package For The Active Queue Management Module Model Verification / T. R. Velieva, A. V. Korolkova, M. N. Gevorkyan et al. // Proceedings 32st European Conference on Modelling and Simulation, ECMS 2018 / Ed. by L. Nolle, A. Burger, C. Tholen et al. — Wilhelmshaven: European Council for Modelling and Simulation, 2018. — Pp. 498–504.

UDC 004.021:519.2:519.6

DOI: 10.22363/2312-9735-2018-26-3-272-284

Parametric Study of the System with Active Queue Management Module

T. R. Velieva

*Department of Applied Probability and Informatics
Peoples' Friendship University of Russia (RUDN University)
6 Miklukho-Maklaya str., Moscow, 117198, Russian Federation*

Self-oscillating modes in control systems of computer networks quite negatively affect the characteristics of these networks. The problem of finding the areas of self-oscillations is actual and important as the study of parameters of self-oscillations. These studies are extremely labor-intensive because of the substantial non-linear nature of the mathematical model. It is of interest to obtain a so-called parametric portrait describing the zones of occurrence of self-oscillations depending on the value of the parameters: one parameter (two-dimensional graph), two parameters (three-dimensional graph), and so on. Such a parametric portrait allows us to purposefully manage the characteristics of the investigated control system. The investigation of the system under consideration on the basis of ordinary linearization by Taylor expansion is not possible because of the disappearance of the self-oscillatory regime. Therefore, the paper describes a parametric study technique based on the method of harmonic linearization. To verify the theoretical results obtained, simulation is used. In addition, it is proposed to use the computer algebra system for analytical calculations. For this, the criteria for choosing software were formulated. Based on these criteria, a set of software for analytical and numerical calculations was proposed.

Key words and phrases: active queue management, simulation, NS2, Julia, SymPy, self-oscillating

References

1. M. Allman, V. Paxson, E. Blanton, TCP Congestion Control, Tech. rep. (sep 2009). doi:10.17487/rfc5681.
2. S. Floyd, V. Jacobson, Random Early Detection Gateways for Congestion Avoidance, *IEEE/ACM Transactions on Networking* 1 (4) (1993) 397–413. doi:10.1109/90.251892.
3. A. V. Korolkova, D. S. Kulyabov, A. I. Chernoiivanov, On the Classification of RED Algorithms, *Bulletin of Peoples' Friendship University of Russia. Series "Mathematics. Information Sciences. Physics"* (3) (2009) 34–46.
4. A. Jenkins, Self-Oscillation, *Physics Reports* 525 (2) (2013) 167–222. arXiv:1109.6640, doi:10.1016/j.physrep.2012.10.007.
5. F. Ren, C. Lin, B. Wei, A Nonlinear Control Theoretic Analysis to TCP-RED System, *Computer Networks* 49 (4) (2005) 580–592. doi:10.1016/j.comnet.2005.01.016.
6. W. Lautenschlaeger, A. Francini, Global Synchronization Protection for Bandwidth Sharing TCP Flows in High-Speed Links, in: *Proc. 16-th International Conference on High Performance Switching and Routing, IEEE HPSR 2015, Budapest, Hungary, 2015*. arXiv:1602.05333.
7. N. Kryloff, N. Bogoliuboff, Les mees symboliques de la Meque non Line dans leur application a de la rence dans l'oscillateur, *Bulletin de l'Académie des Sciences de l'URSS. Classe des sciences mathématiques et na* (1) (1934) 7–34.
8. H. Nyquist, Regeneration Theory, *Bell System Technical Journal* 11 (1) (1932) 126–147. doi:10.1002/j.1538-7305.1932.tb02344.x.
9. V. Misra, W.-B. Gong, D. Towsley, Stochastic Differential Equation Modeling and Analysis of TCP-Windowsize Behavior, *Proceedings of PERFORMANCE 99*.
10. V. Misra, W.-B. Gong, D. Towsley, Fluid-Based Analysis of a Network of AQM Routers Supporting TCP Flows with an Application to RED, *ACM SIGCOMM Computer Communication Review* 30 (4) (2000) 151–160. doi:10.1145/347057.347421.
11. C. V. Hollot, V. Misra, D. Towsley, Wei-Bo Gong, On Designing Improved Controllers for AQM Routers Supporting TCP Flows, in: *Proceedings IEEE INFOCOM 2001. Conference on Computer Communications. Twentieth Annual Joint Conference of the IEEE Computer and Communications Society (Cat. No.01CH37213), Vol. 3, IEEE, 2001*, pp. 1726–1734. doi:10.1109/INFCOM.2001.916670.
12. T. R. Velieva, A. V. Korolkova, D. S. Kulyabov, Designing Installations for Verification of the Model of Active Queue Management Discipline RED in the GNS3, in: *6th International Congress on Ultra Modern Telecommunications and Control Systems and Workshops (ICUMT), IEEE Computer Society, 2015*, pp. 570–577. arXiv:1504.02324, doi:10.1109/ICUMT.2014.7002164.
13. A. V. Korolkova, T. R. Velieva, P. A. Abaev, L. A. Sevastianov, D. S. Kulyabov, Hybrid Simulation of Active Traffic Management, *Proceedings 30th European Conference on Modelling and Simulation (2016)* 685–691doi:10.7148/2016-0685.
14. R. Brockett, Stochastic Analysis for Fluid Queueing Systems, in: *Proceedings of the 38th IEEE Conference on Decision and Control (Cat. No.99CH36304), Vol. 3, IEEE, 1999*, pp. 3077–3082. doi:10.1109/CDC.1999.831407.
15. T. R. Velieva, D. S. Kulyabov, A. V. Korolkova, I. S. Zaryadov, The Approach to Investigation of the Regions of Self-Oscillations, *Journal of Physics: Conference Series* 937 (2017) 012057_1–8. doi:10.1088/1742-6596/937/1/012057.
16. D. S. Kulyabov, A. V. Korolkova, T. R. Velieva, Application of the Harmonic Linearization Method to the Study a Control Systems with a Self-Oscillatory Regime, *RUDN Journal of Mathematics, Information Sciences and Physics* 25 (3) (2017) 234–252, in Russian. doi:10.22363/2312-9735-2017-25-3-234-252.
17. D. S. Kulyabov, A. V. Korolkova, T. R. Velieva, E. G. Eferina, L. A. Sevastianov, The Methodology of Studying of Active Traffic Management Module Self-oscillation Regime, in: *W. Zamojski, J. Mazurkiewicz, J. Sugier, T. Walkowiak, J. Kacprzyk (Eds.), DepCoS-RELCOMEX 2017: Advances in Dependability Engineering of Complex Systems, Vol. 582 of Advances in Intelligent Systems and Computing,*

- Springer International Publishing, Cham, 2018, pp. 215–224. doi:10.1007/978-3-319-59415-6_21.
18. T. Issariyakul, E. Hossain, Introduction to Network Simulator NS2, Springer US, Boston, MA, 2012. doi:10.1007/978-1-4614-1406-3.
 19. R. Lamy, Instant SymPy Starter, Packt Publishing, 2013.
 20. F. Perez, B. E. Granger, IPython: A System for Interactive Scientific Computing, Computing in Science & Engineering 9 (3) (2007) 21–29. doi:10.1109/MCSE.2007.53.
 21. T. E. Oliphant, Python for Scientific Computing, Computing in Science & Engineering 9 (3) (2007) 10–20. doi:10.1109/MCSE.2007.58.
 22. T. E. Oliphant, Guide to NumPy, 2nd Edition, CreateSpace Independent Publishing Platform, 2015.
 23. A. Joshi, R. Lakhanpal, Learning Julia, Packt Publishing, 2017.
 24. T. R. Velieva, A. V. Korolkova, A. V. Demidova, D. S. Kulyabov, Software Package Development for the Active Traffic Management Module Self-Oscillation Regime Investigation, in: W. Zamojski, J. Mazurkiewicz, J. Sugier, T. Walkowiak, J. Kacprzyk (Eds.), DepCoS-RELCOMEX 2018: Advances in Intelligent Systems and Computing, Vol. 761 of Advances in Intelligent Systems and Computing, Springer International Publishing, Cham, 2019, pp. 515–525. doi:10.1007/978-3-319-91446-6_48.
 25. E. Altman, T. Jiménez, NS Simulator for Beginners, Synthesis Lectures on Communication Networks 5 (1) (2012) 1–184. doi:10.2200/S00397ED1V01Y201112CNT010.
 26. B. Welch, K. Jones, Practical Programming in Tcl and Tk, 4th Edition, Prentice Hall, 2003.
 27. A. P. Nadkarni, The Tcl Programming Language: A Comprehensive Guide, CreateSpace Independent Publishing Platform, 2017.
 28. K. R. Rao, D. N. Kim, J. J. Hwang, Fast Fourier Transform - Algorithms and Applications, Signals and Communication Technology, Springer, 2010.
 29. T. R. Velieva, A. V. Korolkova, M. N. Gevorgyan, S. A. Vasilyev, I. S. Zaryadov, D. S. Kulyabov, Software Package For The Active Queue Management Module Model Verification, in: L. Nolle, A. Burger, C. Tholen, J. Werner, J. Wellhausen (Eds.), Proceedings 32st European Conference on Modelling and Simulation, ECMS 2018, European Council for Modelling and Simulation, Wilhelmshaven, 2018, pp. 498–504.

© Велieва Т. Р., 2018

Для цитирования:

Велieва Т. Р. Параметрическое исследование системы с модулем активного управления трафиком // Вестник Российского университета дружбы народов. Серия: Математика. Информатика. Физика. — 2018. — Т. 26, № 3. — С. 272–284. — DOI: 10.22363/2312-9735-2018-26-3-272-284.

For citation:

Velieva T. R. Parametric Study of the System with Active Queue Management Module, RUDN Journal of Mathematics, Information Sciences and Physics 26 (3) (2018) 272–284. DOI: 10.22363/2312-9735-2018-26-3-272-284. In Russian.

Сведения об авторах:

Велieва Татьяна Рефатовна — аспирант кафедры прикладной информатики и теории вероятностей РУДН (e-mail: velieva_tr@rudn.university, тел.: +7(495)9520250)

Information about the authors:

Velieva T. R. — PhD student of Department of Applied Probability and Informatics of Peoples' Friendship University of Russia (RUDN University) (e-mail: velieva_tr@rudn.university, phone: +7(495)9520250)



Компьютерные и информационные науки

УДК 517.9

DOI: 10.22363/2312-9735-2018-26-3-285-291

Методика отыскания алгебраических интегралов дифференциальных уравнений первого порядка

М. Д. Малых, Юй Ин

*Кафедра прикладной информатики и теории вероятностей
Российский университет дружбы народов
ул. Миклухо-Маклая, д. 6, Москва, Россия, 117198*

Статья посвящена отысканию алгебраических интегралов обыкновенных дифференциальных уравнений в системах компьютерной алгебры, основной акцент сделан на выработку практических указаний по работе с оригинальным пакетом Lagutinski for Sage.

В начале статьи формулируется задача Дебона: для заданного дифференциального уравнения $pdx + qdy = 0$, где p, q — многочлены из кольца $\mathbb{Q}[x, y]$, выяснить, имеет ли оно рациональный интеграл, и в случае утвердительного ответа предъявить этот интеграл. Обсуждена проблема отыскания верхней грани для порядка интеграла и её значение для решения дифференциальных уравнений на практике, сформулирована ограниченная задача Дебона. В основу решения задачи положен метод М. Н. Лагутинского и его реализация в системе компьютерной алгебры Sage. Теория и её реализация протестированы на примерах из задачника А. Ф. Филиппова. Прделанные численные эксперименты свидетельствуют, что метода позволяет на практике без особых затрат ресурсов и времени идентифицировать наличие рационального интеграла, однако является весьма затратной как метод вычисления этого интеграла. В заключении даны рекомендации по оптимальному использованию метода М. Н. Лагутинского.

Все вычисления выполнены в системе компьютерной алгебры Sage.

Ключевые слова: метод Лагутинского, задача Дебона, интегральные алгебраические кривые, алгебраические интегралы, Sage

1. Введение

При решении системы дифференциальных уравнений чрезвычайно важно найти все алгебраические интегралы. Авторы XIX века видели в их отыскании первый шаг к построению решения в конечном виде, однако даже в том случае, когда система не допускает решения в символьном виде и поэтому будет решаться приближённо по методу конечных разностей, всегда стремятся строить схемы консервативные, то есть сохраняющие алгебраические интегралы [1]. Применительно к уравнению 1-го порядка её можно сформулировать в следующем виде.

Задача 1 (Дебон). Для заданного дифференциального уравнения

$$pdx + qdy = 0, \quad p, q \in \mathbb{Q}[x, y] \quad (1)$$

выяснить, имеет ли оно интеграл вида

$$r(x, y) = \text{const}, \quad r \in \mathbb{C}(x, y),$$

и в случае утвердительного ответа предъявить этот интеграл.

Статья поступила в редакцию 18 мая 2018 г.

Публикация подготовлена при поддержке Программы РУДН «5-100», «Key Project of Science Foundation of Kai Li University (Z1602)» и при поддержке РФФИ, гранты №№ 18-07-00567 и 18-51-18005. Авторы признательны проф. Л. А. Севастьянову за постоянное внимание и плодотворные обсуждения.

Эта задача, пусть и в других терминах, была предложена Дебоном (Florimond de Beaune, 1601–1652) Декарту ещё в 1640-х годах [2], однако она до сих пор в такой постановке не решена: пользователь любого пакета, ищущего рациональный интеграл, должен задавать верхнюю границу для порядка искомого интеграла [3]. Возникающее тут затруднение можно проиллюстрировать очень простым примером.

Пример 1. Пусть дано уравнение $dy = ydx$. Вслед за Декартом зададимся большим числом N и будем искать его интеграл вида

$$\sum_{n+m \leq N} a_{n,m} x^n y^m$$

по методу неопределённых коэффициентов. Увеличивая N , скажем, от 2 до 10, мы получим несовместную систему для коэффициентов, однако из этого не следует, что так будет проходить при всех N . Несовместность систем при всех N означает, что e^x не является алгебраической функцией. Мы, в отличие от Декарта, можем доказать отсутствие алгебраического интеграла очень просто, сославшись на теорему Сохоцкого–Вейерштрасса или любой другой вариант описания существенной особенности при $x = \infty$. Однако это доказательство не является алгебраическим и существенно использует тот факт, что уравнение $dy = ydx$ допускает решение в целых функциях.

Аналитики XIX века ожидали, что анализ особенностей должен указать на существование или несуществование алгебраического интеграла. Однако в силу теоремы Пенлеве все подвижные особенности являются алгебраическими [4], и поэтому по поведению решения в подвижных особых точках нельзя ничего сказать о существовании интеграла. Исследование же поведения решения в неподвижной особой точке представляет само по себе большие трудности. По этой причине мы обратимся к более простой задаче.

Задача 2. Для заданного дифференциального уравнения (1) и числа N выяснить, имеет ли оно рациональный интеграл, порядок которого не превосходит N , и в случае утвердительного ответа предъявить этот интеграл.

Эта задача может быть решена методом неопределённых коэффициентов, однако на практике такое решение приводит к большим системам нелинейных уравнений на коэффициенты, решение которой приводит к большим вычислительным затруднениям. Накануне Первой мировой войны М. Н. Лагутинский [5–7] разработал метод решения «ограниченной» задачи Дебона. Его метод был надолго забыт и открыт вновь в недавних работах по компьютерной алгебре [8]. Современное изложение метода Лагутинского представлено в работах [3, 8, 9]. Метод Лагутинского хорошо ложится на язык теории колец. Здесь мы хотим обсудить вопросы применения его реализации — пакета Lagutinski для Sage [10] — к решению наиболее часто встречающихся задач.

Согласно основной теореме Лагутинского дифференциальное уравнение (1) имеет рациональный интеграл порядка N тогда и только тогда, когда определитель Лагутинского соответствующего порядка равен нулю, а сам интеграл можно записать как отношение миноров этого определителя. Эта теорема сводит решение ограниченной задачи Дебона к вычислению определителей Лагутинского.

Замечание 1. Теорема Лагутинского позволяет менять числовые поля в исходной задаче. Если дифференциальное уравнение допускает интеграл в поле $\mathbb{C}(x, y)$, то его определитель Лагутинского достаточно большого порядка равен нулю, а поэтому это уравнение допускает интеграл, который представляет собой отношение миноров названного определителя. По предположению коэффициенты дифференциального уравнения — числа целые, поэтому эти миноры принадлежат $\mathbb{Q}(x, y)$, а следовательно, этому полю принадлежит интеграл. Поэтому всегда можно ограничить рассмотрение интегралами из поля $\mathbb{Q}(x, y)$. Это замечание увязывает решение задачи Дебона с вопросами теории чисел. Если дифференциальное уравнение допускает решение, которое при целом x принимает трансцендентное значение, то оно

не допускает алгебраических интегралов. Например, из трансцендентности числа e сразу следует, что уравнение $dy = ydx$ не допускает интеграл в поле $\mathbb{C}(x, y)$.

На практике обычно имеют дело с большими выборками дифференциальных уравнений, будь то задачи из того или иного задачника, или возможные модели для одного и того же явления. Требуется выявить из них те, которые допускают рациональный интеграл. Число N , конечно, не дано, однако очень большие значения N не интересны, поскольку с интегралом 100-го порядка едва ли работать легче, чем со степенными рядами. Вообще говоря, не ясно, как провести эту черту, и вероятно, она зависит от самой задачи. Для дифференциальных уравнений, предлагаемых студентам в курсе «Дифференциальных уравнений», в статье [10] была предложена следующая процедура отыскания алгебраических интегральных кривых:

1. Вычислить Δ_{55} в случайно выбранной точке. Если $\Delta_{55} \neq 0$, то интегральные кривые имеют 10-й порядок и более или вовсе являются трансцендентными. Если $\Delta_{55} = 0$, то интегральные кривые вероятно имеют порядок, не превышающий 9.
2. Если $\Delta_{55} = 0$, вычислить Δ_{10} как функцию x и y . Если Δ_{10} тождественно равен нулю, то интегральные кривые имеют порядок, не превышающий 3, и они находятся по методу Лагутинского без существенных затрат.
3. Если Δ_{10} не равно тождественно нулю, пытаться вычислить Δ_N , постепенно повышая N до тех пор, пока не получится нуль или исчерпаются ресурсы.

Поскольку вычисление определителя 55-го порядка может занять весьма много времени, на первом шаге его значение вычисляется только в одной точке. Если получается ненулевое значение, то в силу теоремы Лагутинского рационального интеграла 9-го порядка точно не существует. Если же получается нулевое значения, нельзя быть вполне уверенным в том, что определитель равен нулю и во всех других точках, однако вероятность того, что при случайном выборе точки вероятность отыскания нуля многочлена весьма мала. Поэтому в этом случае вероятно имеется интеграл 9-го порядка.

Разумеется, на первом шаге теряются дифференциальные уравнения, интегральные кривые которых имеют 10-й порядок и более. На третьем шаге могут возникнуть трудности с вычислением определителя Лагутинского, обычно при $N > 10$ работа с ним становится очень ресурсоёмкой. Поэтому представляется важным понять, работает ли предложенный метод в наиболее часто встречающихся в учебном процессе дифференциальных уравнений. В настоящей работе в качестве собрания таких уравнений использован сборник задач, предлагаемых студентам в курсе «Дифференциальных уравнений». Ниже будет дан отчёт об использовании этой процедуры для интегрирования дифференциальных уравнений 1-го порядка в символьном виде и тестирования названного в его честь пакета на уравнениях, взятых из задачника А. Ф. Филиппова [11].

2. Результаты апробации

На основе задач №№ 301–420 из задачника А. Ф. Филиппова [11] был выделен список из 50 дифференциальных уравнений вида

$$p(x, y)dx + q(x, y)dy = 0, \quad p, q \in \mathbb{Q}[x, y],$$

20 из которых имеют рациональные интегралы, а остальные интегрируются в элементарных функциях.

Прежде всего, следует заметить, что вычисление Δ_{55} в случайной точке позволило быстро выделить все 20 номеров, вероятно допускающих рациональные интегралы. При этом про оставшиеся 30 номеров можно с уверенностью сказать, что их интегральные кривые или являются трансцендентными, или имеют порядок, больший 9-го.

Во-вторых, вычисление Δ_n в случайной точке позволило быстро подобрать n во всех номерах.

Вычисление определителя как многочлена относительно x, y заняло более часа в двух примерах: №№ 395 и 418. Вычисление интеграла заняло более часа в задаче № 361 и было остановлено. Во всех остальных 17 случаях вычисление интеграла было успешным во всех случаях, ответы совпадали с ответами из задачника после упрощений.

Рассмотрим проблемные номера.

Пример 2. Интегральные кривые уравнения № 395

$$(x^3 - 2xy^2)dx + 3x^2ydy = xdy - ydx$$

образуют семейство кривых $x(y^2 + x^2)^3 - 2/5y^5 - 4/3x^2y^3 - 2x^4y + cx^5 = 0$ 6-го порядка. Вычисление определителей в случайной точке однозначно указали на то, что вероятно $\Delta_{36} = 0$, однако вычислить этот определитель за час не удалось.

Пример 3. Интегральные кривые уравнения № 418

$$(3xy + x + y)xdx + (4xy + x + 2y)xdy = 0$$

образуют семейство кривых $6x^3y^4 + 2x^3y^3 + 3x^2y^4 = c$ 7-го порядка. Вычисление определителей в случайной точке однозначно указали на то, что вероятно $\Delta_{31} = 0$, однако вычислить этот определитель за час не удалось.

Пример 4. Интегральные кривые уравнения № 361

$$(2x^2y - 3y^2)y' = 6x^2 - 2xy + 1$$

образуют семейство $2x^3 - x^2y^2 + y^3 + x = c$ 4-го порядка. Мы вычислили $\Delta_{13} = 0$, $\Delta_{12} \neq 0$, поэтому точно существует рациональный интеграл порядка $N = 13$. Вычислить его не удалось.

Глядя в ответы, полученные, разумеется, другими методами, нетрудно понять, что предложенный подход позволил легко и быстро выявить все уравнения, допускающие алгебраические интегралы, но не для всех из них позволил найти явное выражение для интеграла. Наиболее проблемным, таким образом, является третий шаг.

3. Заключение

Проделанные численные эксперименты свидетельствуют, что метод Лагутинского позволяет на практике быстро и без особых затрат ресурсов и времени идентифицировать наличие рационального интеграла, однако является весьма затратным как метод вычисления этого интеграла. Следует заметить, что проблема отыскания границы для порядка интеграла, всегда обсуждаемая в теории, на практике оказалась не важной, в задачнике нет дифференциальных уравнений, интегральные кривые которых имели бы 10 порядок или более.

Вычисление определителей в случайных точках позволяет быстро выяснить, какие мономы должны фигурировать в выражении для интеграла, поэтому естественное направление оптимизации — предварительный подбор базиса по данным в случайных точках. В частности, наиболее интересны те интегралы, которые можно записать как отношение малочленов. В частности, в пакете Lagutinski [10] можно делать перебор по всевозможным тройкам, составленных из первых N мономов кольца $\mathbb{Q}[x, y]$. Двигаясь в этом направлении, можно пытаться увеличить число элементов в кортеже, заменив затратное вычисление определителей Лагутинского вычислением их значения в случайной точке.

Литература

1. *Hairer E., Wanner G., Lubich C.* Geometric Numerical Integration. Structure-Preserving Algorithms for Ordinary Differential Equations. — Berlin Heidelberg New York: Springer, 2000.
2. *Декарт Р.* Геометрия с приложением избранных работ П. Ферма и переписки Декарта. — Москва-Ленинград: ГОНТИ НКТП СССР, 1938. — Перевод, примечание и статья А. П. Юшкевича.
3. *Chéze G.* Computation of Darboux Polynomials and Rational First Integrals with Bounded Degree in Polynomial Time // Journal of Complexity. — 2011. — Vol. 27, issue 2. — Pp. 246–262. — DOI: 10.1016/j.jco.2010.10.004.
4. *Голубев В. В.* Лекции по аналитической теории дифференциальных уравнений. — Москва-Ленинград: ГТТЛ, 1950.
5. *Лагутинский М. Н.* Приложение полярных операций к интегрированию обыкновенных дифференциальных уравнений в конечном виде // Сообщения Харьковского математического общества. Вторая серия. — 1911. — Т. 12. — С. 111–243.
6. *Лагутинский М. Н.* О некоторых полиномах и связи их с алгебраическим интегрированием обыкновенных дифференциальных алгебраических уравнений // Сообщения Харьковского математического общества. Вторая серия. — 1912. — Т. 13. — С. 200–224.
7. *Добровольский В. А., Стрельцын Ж., Локоть Н. В.* Михаил Николаевич Лагутинский (1871–1915) // Историко-математические исследования. — Москва: Янус-К, 2001. — Т. 41, вып. 6. — С. 111–127.
8. *Christopher C., Llibre J., Vitório Pereira J.* Multiplicity of Invariant Algebraic Curves in Polynomial Vector Fields // Pacific Journal of Mathematics. — 2007. — Vol. 229, No 1. — Pp. 63–117. — DOI: 10.2140/pjm.2007.229.63.
9. *Малых М. Д.* Об отыскании рациональных интегралов систем обыкновенных дифференциальных уравнений по методу М. Н. Лагутинского // Вестник Национального исследовательского ядерного университета «МИФИ». — 2016. — Т. 5, № 4. — С. 327–336. — DOI: 10.1134/S2304487X16030068.
10. *Малых М. Д.* О применении метода М. Н. Лагутинского к интегрированию дифференциальных уравнений 1-го порядка. Часть 1. Отыскание алгебраических интегралов // Вестник РУДН. Серия: Математика. Информатика. Физика. — 2017. — Т. 25, № 2. — С. 103–112. — DOI: 10.22363/2312-9735-2017-25-2-103-112.
11. *Филиппов А. Ф.* Сборник задач по дифференциальным уравнениям. — Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2000.

UDC 517.9

DOI: 10.22363/2312-9735-2018-26-3-285-291

The Method of Finding Algebraic Integral for First-order Differential Equations

M. D. Malykh, Yu Ying

*Department of Applied Probability and Informatics
Peoples' Friendship University of Russia (RUDN University)
6 Miklukho-Maklaya St, Moscow, 117198, Russian Federation*

Article is devoted to search of algebraic integrals of the ordinary differential equations in the systems of computer algebra. The main attention is paid to development of practical instructions for work with an original package for Sage called in honor of M. N. Lagutinski.

At the beginning of article Beaune's problem is formulated: for a given differential equation, we need to identify whether it is in the form of rational integral, and if the answer is true, we need to quadrature it. The difficulties of finding the upper bound of the integral order and its

value for solving differential equations practically are discussed, bounded Beaune's problem is formulated. Our work is based on the method of M. N. Lagutinski. The theory and its realization are tested on the problems from Text-Book on Differential Equations by A. F. Filippov. The numerical experiments, which were carried out, show that the method makes it possible to identify the existence of the rational integral without taking much resources and time. However, using the method to calculate integrals is very time-consuming. In conclusion, recommendations on the optimal use of the method of Lagutinski are given. All calculations are executed in the computer algebra system Sage.

Key words and phrases: Lagutinski method, problem of Florimond de Beaune, integrated algebraic curves, algebraic integrals, Sage

References

1. E. Hairer, G. Wanner, C. Lubich, Geometric Numerical Integration. Structure-Preserving Algorithms for Ordinary Differential Equations, Springer, Berlin Heidelberg New York, 2000.
2. R. Descartes, Geometry with the Appendix of Selected Works of P. Fermat and Descartes' Correspondence, GONTI NKTP SSSR, Moscow-Leningrad, 1938, in Russian.
3. G. Chéze, Computation of Darboux Polynomials and Rational First Integrals with Bounded Degree in Polynomial Time, Journal of Complexity 27 (2011) 246–262. doi:10.1016/j.jco.2010.10.004.
4. W. W. Golubev, Vorlesungen über Differentialgleichungen im Komplexen, VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften, Berlin, 1958.
5. M. N. Lagutinski, The Application of Polar Operations to Integration of the Ordinary Differential Equations in Finite Terms, Communications of the Kharkov Mathematical Society. The second series 12 (1911) 111–243, in Russian.
6. M. N. Lagutinski, On Some Polynoms and Their Application for Algebraic Integration of Ordinary Differential Algebraic Equations, Communications of the Kharkov Mathematical Society. The second series 13 (1912) 200–224, in Russian.
7. V. A. Dobrovolsky, J. Strelcyn, N. V. Lokot', Mihail Nikolaevich Lagutinsky (1871–1915), Istoriko-matematicheskie issledovaniya 6 (2001) 111–127, in Russian.
8. C. Christopher, J. Llibre, J. Vitória Pereira, Multiplicity of Invariant Algebraic Curves in Polynomial Vector Fields, Pacific Journal of Mathematics 229 (1) (2007) 63–117. doi:10.2140/pjm.2007.229.63.
9. M. D. Malykh, On M. N. Lagutinsky's Method for Computation of Rational Integrals of Ordinary Differential Equations Systems, Vestnik natsional'nogo issledovatel'skogo yadernogo universiteta "MIFI" 5 (4) (2016) 327–336, in Russian. doi:10.1134/S2304487X16030068.
10. M. D. Malykh, On application of m. n. lagutinski method to differential equations in symbolic form. part 1, RUDN Journal of Mathematics, Information Sciences and Physics 25 (2) (2017) 103–112, in Russian. doi:10.22363/2312-9735-2017-25-2-103-112.
11. A. F. Filippov, Text-Book on Differential Equations, R&C Dynamics, Izhevsk, 2000, in Russian.

© Малых М. Д., Юй Ин, 2018

Для цитирования:

Малых М. Д., Юй Ин Методика отыскания алгебраических интегралов дифференциальных уравнений первого порядка // Вестник Российского университета дружбы народов. Серия: Математика. Информатика. Физика. — 2018. — Т. 26, № 3. — С. 285–291. — DOI: 10.22363/2312-9735-2018-26-3-285-291.

For citation:

Malykh M. D., Yu Ying The Method of Finding Algebraic Integral for First-order Differential Equations, RUDN Journal of Mathematics, Information Sciences and Physics 26 (3) (2018) 285–291. DOI: 10.22363/2312-9735-2018-26-3-285-291. In Russian.

Сведения об авторах:

Малых Михаил Дмитриевич — кандидат физико-математических наук, доцент кафедры прикладной информатики и теории вероятностей РУДН (e-mail: malykh_md@rudn.university, тел.: +7(495)9522572)

Юй Ин (Китайская Народная Республика) — аспирант кафедры прикладной информатики и теории вероятностей РУДН (e-mail: yingy6165@gmail.com, тел.: +7(495)9522572)

Information about the authors:

Malykh M. D. — Candidate of Physical and Mathematical Sciences, assistant professor of Department of Applied Probability and Informatics of Peoples' Friendship University of Russia (RUDN University) (e-mail: malykh_md@rudn.university, phone: +7(495)9522572)

Yu Ying (People's Republic of China) — graduate student of Department of Applied Probability and Informatics of Peoples' Friendship University of Russia (RUDN University) (e-mail: yingy6165@gmail.com, phone: +7(495)9522572)



Правила оформления статей

Редколлегия журнала «Вестник Российского университета дружбы народов», серия «Математика. Информатика. Физика» просит авторов придерживаться следующих правил при представлении статьи в журнал.

1. Статьи представляются на русском или английском языке.
2. Объём статьи не должен превышать 0,75 авт. печ. л.
3. Автор представляет в редакцию электронную версию рукописи, набранную в системе \LaTeX (используется версия $\text{\LaTeX} 2_{\epsilon}$, для набора формул используется макропакет $\mathcal{A}\mathcal{M}\mathcal{S}\text{-}\text{\LaTeX}$). К электронному варианту прилагается отпечатанный на бумаге экземпляр или файл в формате Postscript или PDF. Для каждой статьи указываются коды УДК и MSC (PACS).
4. Название, аннотация, ключевые слова, фамилии и инициалы авторов, название организации, где работают авторы, предоставляются на русском и английском языках.
5. Аннотация (от 150 до 250 слов) должна описывать основные цели исследования; объяснять, как было проведено исследование, без методологических деталей; суммировать наиболее важные результаты и их значение; быть написана качественным русским/английским языком. В аннотации не допускаются ссылки на цитируемую литературу, аббревиатуры и громоздкие формулы.
6. Текст статьи должен включать введение, заключение, список использованных источников (не менее 5). Глубина разбивки текста не должна превышать трёх уровней (разделы, пункты и подпункты).
7. Рисунки принимаются в электронном виде. Каждый рисунок должен быть помещён в отдельный файл. Принимаемые форматы файлов: 1) векторные: PDF, EPS, \TeX ; 2) растровые: PNG, TIFF, GIF (возможна инкапсуляция в EPS).
8. Размер рисунка вместе с подписью не должен превышать 14x19 см. Разрешение растрового рисунка должно находиться в пределах 300–600 dpi.
9. Рисунки должны быть чёрно-белые. Возможность использования полутоновых и фотографических изображений может быть рассмотрена отдельно. Фоны должны быть только штрихованные. Сеточные фоны и полутона не допускаются.
10. Список литературы подготавливается в системе \BibTeX и представляется в двух отдельных файлах — по требованиям ГОСТ 7.1-84 (смешанный список источников на русском и других языках) и по стандарту Harvard (полностью на иностранном языке (англ., франц., нем., исп.); для источников на русском языке требуется перевод на английский язык). Ссылки на неопубликованные работы не допускаются.
11. Рукопись должна быть тщательно выверена. Необходимо указать точные сведения об авторах: фамилию, имя, отчество полностью, учёную степень, учёное звание, должность с указанием подразделения и организации, почтовый и электронный адрес места работы авторов и телефоны. После подготовки редакцией к набору размеченный и исправленный автором текст статьи и исправленная электронная версия возвращаются в редакцию. Корректра для просмотра высылается по e-mail.
12. Возвращение статьи автору на доработку не означает, что она принята к опубликованию. Доработанный вариант статьи редколлегия рассматривает вновь. В случае отклонения статьи редколлегия оставляет за собой право не возвращать автору один её экземпляр.
13. Все статьи, планируемые к публикации в журнале, проходят обязательную процедуру рецензирования двумя рецензентами, являющимися экспертами в данной области. Один из рецензентов может быть выбран из состава редколлегии (внутреннее рецензирование). В обязательном порядке статья направляется независимому эксперту (на внешнее рецензирование). Процедура рецензирования является анонимной для авторов. По результатам рецензирования статья может быть отклонена, направлена автору на доработку или принята к печати. Требования к рецензиям: оценка существа работы и возможности её публикации в журнале; конкретное перечисление ошибок в методологии и инструментарии (если они есть); предложения по доработке текста.

14. При получении положительного заключения рецензента материалы помещаются в «портфель» редакции для дальнейшего опубликования. При получении отрицательного заключения одного из рецензентов статья рассматривается на заседании редакционной коллегии, которая принимает решение об отклонении статьи или о необходимости получения дополнительной рецензии независимого эксперта.

Контактный адрес для решения технических вопросов по предоставляемым материалам в журнал Вестник РУДН. Серия «Математика. Информатика. Физика»: Россия, Москва, ул. Орджоникидзе, д. 3, комн. 313; e-mail: vestnik-miph@sci.pfu.edu.ru.

Адрес для переписки: 117198, Россия, Москва, ул. Миклухо-Маклая, д. 6, факультет физико-математических и естественных наук, профессору Севастьянову Л. А.

ф. СП-1

ФГУП «ПОЧТА РОССИИ»

АБОНЕМЕНТ на журнал

18235

(индекс издания)

ВЕСТНИК РУДН

**Серия «Математика.
Информатика. Физика»**

Количество
комплектов:

на 20__ год по месяцам

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12

Куда

(почтовый индекс)

(адрес)

Кому

(фамилия, инициалы)

ДОСТАВОЧНАЯ КАРТОЧКА

на журнал

18235

(индекс издания)

ПВ	место	литер

ВЕСТНИК РУДН

Серия «Математика. Информатика. Физика»

Стои- мость	подписки	_____ руб. ___ коп.	Количество комплектов:
	переадресовки	_____ руб. ___ коп.	

на 20__ год по месяцам

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12

Куда

(почтовый индекс)

(адрес)

Кому

(фамилия, инициалы)