

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Московский государственный технологический университет «СТАНКИН»

На правах рукописи



Пхью Вэй Лин

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕПЛО- И МАССОПЕРЕНОСА И ФАЗОВЫХ
ПЕРЕХОДОВ В ВЫСОКОДИСПЕРСНЫХ СИСТЕМАХ ПРИ
ВОЗДЕЙСТВИИ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ПОЛЯ**

1.2.2 – Математическое моделирование, численные методы и комплексы
программ

диссертация на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:
доктор физико-математических наук, профессор
Уварова Людмила Александровна

Москва – 2025

ОГЛАВЛЕНИЕ

ВВЕДЕНИЕ	5
ГЛАВА 1. МОДЕЛИРОВАНИЕ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ «ЖИДКОСТЬ-ГАЗ» И МАССОПЕРЕНОСА В НЕОДНОРОДНЫХ СИСТЕМАХ	16
1.1 Виды фазовых переходов.....	19
1.1.1 Фазовый переход жидкость-газ	22
1.1.2 Моделирование парообразования капель различных условиях.....	25
1.1.3 Парообразование жидких смесей из капилляров	29
1.1.4 Парообразование жидких смесей из пористых материалов	30
1.2 Некоторые решения для вектора напряженности электрического поля	32
1.3 Задачи типа «реакция-диффузия».....	35
1.4 Выводы по главе 1	37
ГЛАВА 2. МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ.....	39
2.1 Хаотические и динамические системы	39
2.2 Хаос в гамильтоновых системах	45
2.3 Виды энтропии.....	52
2.4 P –адические числа.....	56
2.5 Методы моделирования с применением теории перколяции	61
2.6 Выводы по главе 2	75
ГЛАВА 3. ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ПОЛЕЙ С НАНО-И МЕЗОСИСТЕМАМИ И ИНДУЦИРОВАННЫЕ ЭФФЕКТЫ.....	77

3.1	Некоторые решения нелинейных электродинамических уравнений.....	77
3.2	Модель тепломассообмена	81
3.3	Анализ полученных результатов	87
3.4	Математические модели электромагнитного резонанса	99
3.5	Моделирование индуцированных эффектов	111
3.7	Выводы по главе 3	127
ГЛАВА 4. МОДЕЛИРОВАНИЕ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕТОДОВ ТЕОРИИ ПЕРКОЛЯЦИИ И P-АДИЧЕСКОГО АНАЛИЗА		129
4.1	Число Кнудсена	129
4.2	Модель фазового перехода в системе «жидкость – газ» в ограниченной области.....	133
4.3	Некоторые аспекты рассмотрения задачи фазового перехода с использованием p -адического анализа	146
4.4	Выводы по главе 4	156
ГЛАВА 5. АЛГОРИТМЫ И КОМПЛЕКС ПРОГРАММ		157
5.1	Блок-схема модификации алгоритма модели	158
5.2	Комплекс программ.....	160
5.3	Выводы по главе 5	166
ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ.....		168
СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ.....		171
ПРИЛОЖЕНИЯ		198
	Приложение А. Некоторые примеры гамильтониана.....	198

Приложение Б. Таблица интегралов K_{10} , K_{1n} и K_{2n} для параграф (3.2) модель теплопереноса	200
Приложение В. MATLAB коды для модификации расчётов по тепло-и массопереносу	201
Приложение Г. MATLAB коды для модификации алгоритма Хошена Копельмана	210
Приложение Д. Акт о внедрении в учебный процесс	214

ВВЕДЕНИЕ

Актуальность темы диссертации. В настоящее время во всем мире имеет место большой интерес к мезо- и наночастицам радичных веществ. Это связано с тем, что из-за их реальных свойств использование нано- и мезосистем постепенно становится возможным в различных областях. Свойства наноструктур могут быть связаны с изменением размера, формы, организации и ядерной структуры, и, следовательно, поведение маленьких частиц может существенно отличаться от объёмного вещества.

Поэтому изучение фазовых переходов ввиду широкого распространения новых материалов, сред, мезо- и наноструктур приобретает важное значение. Исследование фазовых переходов и процессов переноса требует применения и развития современных разделов математических методов моделирования. Для моделирования фазовых переходов в настоящее время используются, например метод фазового поля, метод ренорм-группы, стохастический анализ и другие.

В диссертационной работе будут исследоваться фазовые переходы первого рода в поле электромагнитного излучения с использованием современных математических методов моделирования.

Остановимся на сферах приложения: в связи с необходимостью разработки управления металлическими и диэлектрическими частицами различных размеров стало важным изучение взаимодействия электромагнитного излучения с высокодисперсными структурами.

Понимание природы фазовых переходов в самом широком смысле представляется необходимым для понимания фундаментальной природы физических явлений.

В биологических системах примеры фазовых переходов включают формирование липидного бислоя, переход катушки-глобулы в процесс сгибания белка, плавление ДНК и многие другие.

В наноэлектронике фазовые переходы могут служить основой для разработки новых устройств, таких как мемристоры и память на основе фазовых переходов. В катализе они способны значительно влиять на активность и селективность каталитических наночастиц. В технологиях накопления и преобразования энергии, таких как аккумуляторы, суперконденсаторы и топливные элементы, фазовые переходы играют важную роль.

Тем не менее, из-за уникальных физических и химических свойств наноструктур, наряду с положительными эффектами, они могут представлять и определённые риски. Однако, благодаря многочисленным преимуществам, использование наночастиц в различных областях становится всё более приоритетным.

Степень разработанности проблемы. В середине 19 века появилось предположение о том, что случайные события происходят в системах, описывающих сложные процессы. В 1860 году Джеймс Максвелл высказал идею, что столкновения молекул газа способны усиливать малые возмущения, приводя к хаотичному поведению [1]. В 1890 году Анри Пуанкаре выявил, что решение задачи трёх тел зависит от начальных условий и предположил, что подобные явления могут быть широко распространены [2].

Феноменологическая теория Ландау (1937) является одной из первых теорией фазовых переходов. Благодаря теории Л.Д. Ландау и флуктуационной теории фазовых переходов произошел значительный прогресс в качественном понимании непрерывных фазовых переходов, а также в их количественном описании. Точное решение для 2D модели Изинга было найдено Л. Онсагером в 1944 году. При этом полученные им результаты резко отличались от результатов предсказываемых теорией Ландау.

Труды Анри Пуанкаре, Алексея Михайловича Ляпунова, Джорджа Дейвида Биркгофа и Андрея Николаевича Колмогорова заложили основы теории хаоса и стимулировали развитие нелинейной динамики и качественной теории дифференциальных уравнений. Уравнения Навье-Стокса для потока жидкости, несмотря на трудность их полного анализа, могут быть упрощены для частных случаев. Полученные результаты и их связь с энтропией, позволяли делать качественные и количественные оценки для фазовых превращений в различных системах. Из приведённых примеров следует, что исследование фазовых переходов, а также сопровождающих их процессов тепло- и массопереноса, является важным для самых разных научных и технических областей.

Ввиду всё большего внедрения в различных технических приложениях мезо- и наноструктур, а также материалов с заданными свойствами, исследование фазовых переходов и процессов переноса в таких системах, является достаточно актуальным. Кроме того, важным является учёт влияния внешних воздействий, прежде всего электромагнитного поля, которое, в свою очередь, зависит от характеристик таких систем. В диссертации планируется построить математические модели, разработать метод и алгоритмы для их анализа и получения решений в таких системах, разработать программный комплекс для проведения вычислительных экспериментов.

В 1944 году в работе «К проблеме турбулентности» [3] Лев Давидович Ландау анализировал периодические и квазипериодические уравнения и он предположил, что турбулентность в жидкости возникает, когда изменение одного или нескольких параметров системы приводит к каскаду бифуркаций, изменяющих характер движения динамической системы на протяжении длительного времени. Немецкий математик Эберхард Хопф развивал другое аналогичное предположение в своей работе 1948 года [4, 5] и данный подход к возникновению турбулентности называют сценарием Ландау-Хопфа. Таким образом, качественный переход «ламинарное течение-турбулентность» представляет собой переход от

детерминированного течения к хаотическому. Турбулентное поведение системы связано с появлением нового типа аттрактора в фазовом пространстве – странного аттрактора. Траектории системы оказались хаотичными и сформировали фрактальную структуру. Странный аттрактор, обнаруженный в этой системе, стал признаком турбулентности и привёл к новому подходу в изучении динамических систем [6,7]. В 1963 году Эдвард Лоренц, исследуя конвекцию в двумерном слое, выявил хаотичное поведение, связанное с чувствительностью к начальным условиям, и визуализировал первый странный аттрактор — «систему Лоренца» [8,9]. В 1969 году Мишель Хенон показал, что важные свойства системы можно сохранить, используя сечение Пуанкаре [10].

Как и система Лоренца, отображение Хенона обладает хаотическим аттрактором. Этот аттрактор возник в результате бифуркаций или по сценарию Фейгенбаума [11,12]. Исследования показали, что многие динамические системы, такие, как система Лоренца, Рёсслера и Чуа, содержат самовозбуждающиеся аттракторы, притягивающие траектории к устойчивым состояниям. Позже были обнаружены скрытые аттракторы, не связанные с неустойчивыми равновесиями, что затрудняет их локализацию. Появление скрытых аттракторов относится ко второй части 16-й проблемы Гильберта [13]. Скрытые аттракторы были обсуждены в гипотезах Айзермана и Кальмана, а также в контрпримерах к их предположениям [14]. Новый метод поиска скрытых аттракторов в многомерных системах был разработан Геннадием Александровичем Леоновым и Николаем Владимировичем Кузнецовым в 2010 году [15]. Позже этот метод впервые позволил выявить скрытый хаотический аттрактор в электронной схеме Чуа [16-20].

Ряд важных результатов в области применения нейронных сетей с радиальными базисными функциями – RBF, к решению дифференциальных и интегральных уравнений получено Е. Канза. В работах В. И. Горбаченко [21-26] для решения дифференциальных уравнений с частными производными применялись клеточные нейронные сети (CNN).

В книге [27] отражен формализм, позволяющий изучать непосредственно бесконечные системы статистической механики в пространстве или на решетках. В монографиях [28,29] рассматривается перемешивающий слой, который может являться моделью слоя, в котором непосредственно происходит фазовый переход. Непосредственно процесс испарения в дисперсных системах, таких, как капли и капилляры, рассматривается во многих работах, начиная с классических работ Кнудсена и Фукса. Рассматривалось как испарение, происходящее вследствие разности давления насыщенного пара на поверхности испарения и давления пара вдали от неё, так и испарение, обусловленное тепловым источником. Можно указать такие работы, как [30-37] и др. Применение динамических систем для моделирования процесса испарения в дисперсных неоднородных по составу (бинарные и многокомпонентные растворы) системах исследовалось рядом авторов. В частности можно указать работы таких авторов как Л. А. Уварова, Ю. И. Яламов, Е. Р. Щукин и др. В работах [38,39] развивается подход моделирования возникновения фазовых переходов в r -адическом пространстве с использованием квазигиббсовской меры. Большое количество работ, посвященное данной проблеме, свидетельствует о научном интересе к ней. Вместе с тем многие вопросы, в частности, такие как процессы фазовых переходов и тепло- и массопереноса в высокодисперсных нелинейных системах в электромагнитных полях ещё недостаточно разработаны.

Настоящая работа проводилась при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках проекта FSFS – 20240007.

Целью диссертационной работы является установление качественных и количественных закономерностей нелинейных тепло- и массопереноса и фазовых переходов первого рода в дисперсных системах под действием электромагнитного поля за счёт разработки математических моделей, метода и алгоритмов.

Для достижения поставленной цели необходимо решить следующие задачи:

1. Провести анализ существующих подходов к моделированию фазовых переходов и тепломассопереноса в дисперсных системах при внешнем воздействии.
2. Провести обзор современных математических методов, применяемых для моделирования фазовых переходов и процессов переноса.
3. Разработать математическую модель определения условий возникновения электромагнитного резонанса при воздействии нелинейного электромагнитного поля на дисперсные частицы.
4. Разработать численно-аналитический метод определения температуры в дисперсной системе в электромагнитном поле, особенностью которого является выделение резонансной гармоника.
5. Исследовать тепло-и массоперенос (индуцированные эффекты) в двухслойных мезо- и наносистемах с использованием предложенной модели и метода.
6. Разработать модификацию алгоритма Хошена-Копельмана для применения в моделировании фазовых переходов первого рода.
7. Разработать модель фазового перехода первого рода «жидкость-газ» в ограниченной области с испаряющейся поверхностью мезо- или наноструктуры.
8. С использованием построенной модели рассмотреть возможность применения р-адического анализа и модели Поттса для выявления деталей фазовых переходов первого рода и определения энтропии.
9. На основе построенных моделей и алгоритмов разработать комплекс программ и провести вычислительные эксперименты.

Объектом исследования являются жидкие и твёрдые мезо- и нанообъекты с нелинейными свойствами, находящиеся в газовой сфере и подверженные воздействию электромагнитного поля.

Предметом исследования являются численные и аналитические методы анализа и исследования процессов тепло-и массопереноса и фазовых переходов при внешних воздействиях электромагнитных полей.

Научная новизна заключается в следующем:

1. Разработана математическая модель для определения условий возникновения электромагнитного резонанса в оптически нелинейных системах, диэлектрическая проницаемость которых зависит от поля: для двухслойных сферических частиц и двух близко расположенных дисперсных частиц.
2. Разработан численно-аналитический метод определения температуры в дисперсной системе в нелинейном электромагнитном поле, особенностью которого является выделение резонансной гармоники.
3. Выявлены закономерности и особенности индуцированного теплопереноса в двухслойных мезо- и наносистемах, а также в системе с двумя сферическими частицами, взвешенными в континуальной среде, с различными оптическими и теплофизическими свойствами. В двухслойной сферической частице выявлены закономерности и особенности массопереноса вида «диффузия-реакция», обусловленного нагреванием вследствие воздействия электромагнитного поля.
4. Разработана модификация алгоритма Хошена–Копельмана, позволяющая проводить вычисления для моделирования фазовых переходов первого рода в высокодисперсных системах в приповерхностном слое. В модификацию включено число Кнудсена, а заполнение узлов или ячеек происходит с вероятностью, рассчитываемой с помощью зависящей от температуры функции распределения по скоростям.
5. Предложена модель фазового перехода для системы «жидкость-газ» в виде древовидных графов состояний, зависящих от температуры на поверхности испарения и для газовой фазы вблизи поверхности фазового перехода. С использованием построенной модели предложен подход применения р-адического анализа и модели Поттса.

Теоретическая значимость заключается в предложении новых моделей для описания фазовых переходов на границе жидкости и газа, а также в предложенном методе определения температуры для мезо- и наносистем, находящихся в электромагнитном поле. Предложенные модели, метод и алгоритмы могут формировать основу для более сложных систем, например, для коллективов неоднородных частиц с нелинейными свойствами. Решаемая задача имеет важное фундаментальное значение для развития такой отрасли знаний как прикладная математика и прикладное значение для приборостроения и нанотехнологий.

Практическая значимость. Разработанные математические модели, алгоритмы и программный комплекс могут быть использованы в непосредственных расчётах для высокодисперсных структур, находящихся в поле электромагнитного излучения, а также для управления мезо- и наночастицами в жидких и газовых средах с применением электромагнитного источников. Исследуемая проблема имеет важное прикладное значение для таких отраслей народного хозяйства, как приборостроение, нанотехнологии и другие. В том числе, исследование решаемой задачи имеет большое значение для народного хозяйства в Республике Союз Мьянма: для усовершенствования процессов сушки сельскохозяйственных культур и пищевых продуктов с использованием электромагнитных полей, для оптимизации удаления влаги и сохранения качества, развития синтеза и обработки структур и материалов. Это могут быть наночастицы или покрытия, которые имеют важное значение для растущего промышленного сектора Мьянмы: разработка эффективных технологий очистки воды и отходов с использованием фазовых переходов и электромагнитных методов для решения местных экологических проблем, усовершенствование солнечных тепловых систем и процессов переработки биомассы с помощью передовых моделей тепло- и массообмена, способствующих внедрению решений в области устойчивой энергетики в Мьянме.

Результаты работы также могут быть использованы при обучении студентов по направлениям: «Информатика и вычислительная техника», «Прикладная математика», «Прикладная информатика», «Физика и технология наноструктур», «Лазерная техника и лазерные технологии».

Методы исследования. В диссертации использовались методы математической физики, численные методы, методы p -адического анализа, методы теории перколяции, теория графов, положения теории хаоса, положения электродинамики, теплофизики, физической кинетики.

На основе разработанных моделей, метода и алгоритмов при помощи прикладного ПО MatLab r2021a создан комплекс программ.

Основные положения, выносимые на защиту:

1. Модель определения условий возникновения электромагнитного резонанса для оптически нелинейных дисперсных частиц.
2. Численно-аналитический метод определения температуры в дисперсной системе в электромагнитном поле, особенностью которого является выделение резонансной гармоника.
3. Результаты исследования закономерностей и особенностей тепло- и массопереноса в электромагнитном поле в двухслойных мезо-и наносистемах с нелинейными свойствами. Результаты исследования закономерностей и особенностей нелинейного теплопереноса в двух близко расположенных дисперсных частицах в электромагнитном поле.
4. Модифицированный алгоритм Хошена-Копельмана для моделирования фазовых переходов первого рода.
5. Модель фазового перехода первого рода для высокодисперсных структур вблизи поверхности испарения.
6. Предложенный подход моделирования фазового перехода первого рода с использованием p - адического анализа.

7. Программный комплекс для вычислений на основе разработанных моделей и алгоритмов.

Степень достоверности: Достоверность результатов обусловлена применением корректного математического аппарата математической физики и других разделов, указанных выше, применением известных алгоритмов для проведения расчётов в отдельных блоках программного комплекса. Результаты согласуются с известными результатами в предельных случаях.

Результаты диссертации апробированы на международных конференциях и опубликованы в рецензируемых научных изданиях.

Апробация полученных результатов:

Основные результаты и аспекты работы докладывались на

1. Международной конференции «Моделирование нелинейных процессов и систем», Россия, Москва, 2019 г., 2020 г., 2021 г., 2022 г., 2023 г., 2024 г.
2. Конференции «Математика. Компьютер. Образование» (МКО), Россия, г. Пушкино/ г. Дубна, 2019 г., 2020 г., 2021 г.
3. 18 международной конференции по численному анализу и прикладной математике (ICNAAM 2020), Греция, Родос, 2020 г.
4. 2020 IEEE Conference on Computer Applications (ICCA), Yangon, Myanmar, 2020 г.
5. 4th International Conference on Intelligent Computing and Control Systems (ICICCS), Madurai, India, 2020.

Публикации. Основные результаты работы опубликованы в 11 изданиях, включая 2 статьи в журналах ВАК и 1 статью в журнале Scopus, список публикаций приведён в конце автореферата.

Соответствие паспорту специальности. Диссертационная работа соответствует научной специальности 1.2.2 - Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ паспорту специальности по следующим пунктам:

1. Пункт 1. Разработка новых математических методов моделирования объектов и явлений.
2. Пункт 5. Комплексные исследования научных и технических проблем с применением современной технологии математического моделирования и вычислительного эксперимента.

Структура и объем диссертационной работы. Диссертация включает введение, 5 глав и основные выводы, имеет общий объём 214 страниц, содержит 27 рисунка и 3 таблицы, 4 приложения, включая акт о внедрении в учебный процесс. Список цитируемой литературы насчитывает 213 наименований.

ГЛАВА 1. МОДЕЛИРОВАНИЕ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ «ЖИДКОСТЬ-ГАЗ» И МАССОПЕРЕНОСА В НЕОДНОРОДНЫХ СИСТЕМАХ

Качественный перевод вещества из одного состояния в другое называется фазовым переходом. В равновесной термодинамике, фазой называется равновесное состояние вещества, которое отличается по физическим свойствам от других возможных равновесных состояний того же вещества. Фазовый переход — это процесс перехода вещества из одной фазы в другую и всегда связан с качественными изменениями свойств веществ. Фазовый переход можно классифицировать на основе термодинамического процесса (Эренфест - 1933) и механики процесса (Бюргер - 1951). Схема классификации приведена на рис.1.1. В дальнейшем, в 3 и 4 главах мы рассматриваем фазовые переходы первого рода, такие как « Жидкость – газ», «твёрдое вещество – газ».



Рисунок 1.1- Схема классификации фазовых переходов

В механической классификации, фазовые переходы могут быть классифицированы на основе механического поведения материалов при воздействии изменений внешних условий, таких как температура, давление, напряжение или деформация. Эти переходы часто связаны с изменениями структурного расположения, механических свойств и внутренней энергии материала. Механическая классификация фазовых переходов фокусируется на том, как механические свойства материалов, такие как напряжение, деформация, упругость и деформирование, изменяются под воздействием внешних факторов, таких как температура, давление и механическое напряжение. В современном смысле, фазовые переходы в механической классификации включают в себя переходы между различными механическими свойствами (эластичность, пластичность, хрупкость, податливость) и структурными переходами (например, мартенситные превращения). Эта классификация выходит за рамки традиционной термодинамической перспективы, подчеркивая, как механическое напряжение или деформация влияют на переходные процессы в материале.

Современная классификация фазовых переходов в механическом контексте претерпела значительные изменения, включив в себя как термодинамические, так и механические аспекты, что позволило получить более целостное представление о поведении материалов. Традиционные фазовые переходы были сосредоточены в основном на тепловых эффектах (фазовые переходы первого и второго рода), но современная классификация расширилась и включает: упругопластические переходы, переходы разрушения, дислокационные и сдвиговые превращения, сверхупругость и сверхпластичность, квантовые и наноразмерные механические переходы. В современной классификации, внешние механические воздействия, зависимость от времени, симметрия и топология играют решающую роль в иницировании фазовых переходов.

Концепция механической классификации и более глубокое понимание фазовых переходов начали формироваться в середине 20-го века, по мере развития

науки о материалах и развития физики твердого тела. Современная классификация фазовых переходов стала включать термодинамические, кинетические и механические аспекты, особенно с развитием неравновесной термодинамики, кристаллографии и изучения дислокаций в кристаллах.

Первая работа по статистической механике, выполненная Людвигом Больцманом в 1800-х годах, заложила основу для понимания фазовых переходов с микроскопической точки зрения. В 1937 году Лев Ландау представил концепцию фазовых переходов, нарушающих симметрию, что стало значительным шагом на пути к современной классификации. Его теория фазовых переходов второго рода (теория Ландау) обеспечила важнейшую теоретическую основу. Работа Л. Д. Ландау, Э. М. Лифшица и Л. П. Питаевского [40] сыграла важную роль в расширении и модернизации понимания фазовых переходов, включая механические аспекты физической кинетики и неравновесных процессов. В [40] обсуждается как могут происходить фазовые переходы в неравновесных системах (например, дислокации в кристаллах, пластическая деформация при напряжении). Эти неравновесные процессы часто находятся в центре внимания современного материаловедения, особенно при изучении материалов, подвергающихся механическим нагрузкам или быстрому охлаждению. В книге также рассматриваются динамика и временные рамки фазовых переходов, что имеет решающее значение для понимания процессов ползучести и усталости в материалах, где фазовые изменения происходят в течение длительного времени. Зарождение и рост новых фаз при механическом напряжении - это кинетические процессы, которые со временем влияют на механические свойства материалов. Авторы исследуют роль корреляционных функций в фазовых переходах, особенно в неравновесных и сложных системах. В книге рассматривается диффузия атомов и дефектов (например, перемещение дислокаций при пластической деформации), которые, называемые явлениями переноса, играют центральную роль в кинетике фазовых переходов.

1.1 Виды фазовых переходов

Выделяются два вида фазового перехода:

- Фазовый переход первого рода
- Фазовый переход второго рода

Фазовый переход первого рода включает поглощение или выделение тепла (например, плавление, кристаллизация). Фазовые переходы первого рода характеризуются постоянной температурой, изменениями энтропии и объёма. Например, при плавлении вещества сначала в процессе нагревания температура повышается и свойства вещества изменяются медленно с её повышением. Однако при некоторой температуре T_* происходит внезапное и резкое изменение. Тепловое движение молекул воды становится настолько сильным, что разрушает кристаллическую структуру. T_* , и образуется новая фаза воды, жидкая фаза. При температуре фазового перехода 0°C твёрдая и жидкая фазы вещества сосуществуют. Для такого перехода требуется конечное количество тепла, так называемое скрытое тепло. Фазовые переходы, включающие скрытую теплоту в данном случае, это теплота плавления называются переходами первого порядка. При этом функция, характеризующая процесс, в данном случае, температура остаётся непрерывной.

Характерные свойства фазовых переходов первого рода :

1. Неоднородность: при нагревании твёрдого вещества при температуре T_* , оно внезапно начинает превращаться в жидкость, которая имеет отличительные свойства от твёрдого вещества. Аналогично, при нагревании жидкости при температуре (испарения) она внезапно начинает превращаться в газ.
2. При заданном давлении фазовый переход происходит при фиксированной температуре, например, при атмосферном давлении лёд тает при 0°C , сохраняя эту температуру до полного таяния. Изменение давления меняет температуру фазового перехода.

3. Переход вещества из одной фазы в другую всегда сопровождается поглощением или выделением скрытой теплоты, известной как теплота фазового перехода. Например, при нагревании жидкости мы достигаем точки кипения. Далее подвод тепла не приводит к повышению температуры. Подвод тепла используется для преобразования жидкости в пар. Во время этого перехода скрытая теплота (теплота испарения) поглощается.
4. При фазовом переходе изменяется удельный объем фазы, то есть объём вещества на единицу массы:

$$V_{\text{уд}} = \frac{V}{m}.$$

Фазовый переход второго рода переход не зависит от поглощения или выделения тепла и изменения объема. Он характеризуется постоянным объемом и энтропией, но скачкообразным изменением теплоемкости. Фазовой переход второго рода связан с изменением симметрии: над точкой перехода система имеет более высокую симметрию, чем под ней. Например, при комнатной температуре железо ферромагнитно, то есть проявляет спонтанную намагниченность. С повышением температуры намагниченность непрерывно уменьшается из-за тепловых флуктуаций спинов. При температуре перехода (так называемой точке Кюри) 770°C намагниченность исчезает, и железо становится парамагнитным при более высоких температурах. В данном случае, скрытого тепла нет. Этот тип фазового перехода называется непрерывным вторым порядком переходом.

Фазовые переходы второго рода включают:

- Явление сверхтекучести (переход гелия I в гелий II);
- Переход металлов в сверхпроводящее состояние;
- Переход вещества из ферромагнитного в парамагнитное состояние при определённой температуре.

Фазовые переходы второго рода связаны с появлением новых качественных свойств в системе. Например, при превращении жидкого гелия I в гелий II

жидкость сохраняет состояние, но получает новые характеристики, как отсутствие вязкости, т.е приобретает свойство сверхтекучести. Понятий классической физики недостаточно для понимания фазовых переходов второго. Их можно объяснить только на основе квантовых представлений.

Тепловые (классические) переходы или упорядоченный фазовый переход связаны с тепловыми флуктуациями. Фазовые переходы, объяснимые с квантовых позиций, происходят при некоторой температуре, когда изменяется не тепловой параметр, такой как давление, химический состав или магнитное поле. Флуктуации, разрушающие упорядоченную фазу в этих переходах, не имеют тепловой природы. Они являются квантовыми флуктуациями, которые являются следствием принципа неопределенности Гейзенберга. По этой причине эти переходы называются квантовыми фазовыми переходами.

Диаграмма, показывающая стабильную фазу системы для каждой комбинации макроскопических переменных называется её фазовой диаграммой. Пример такой диаграммы представлены на рисунке 1.2.

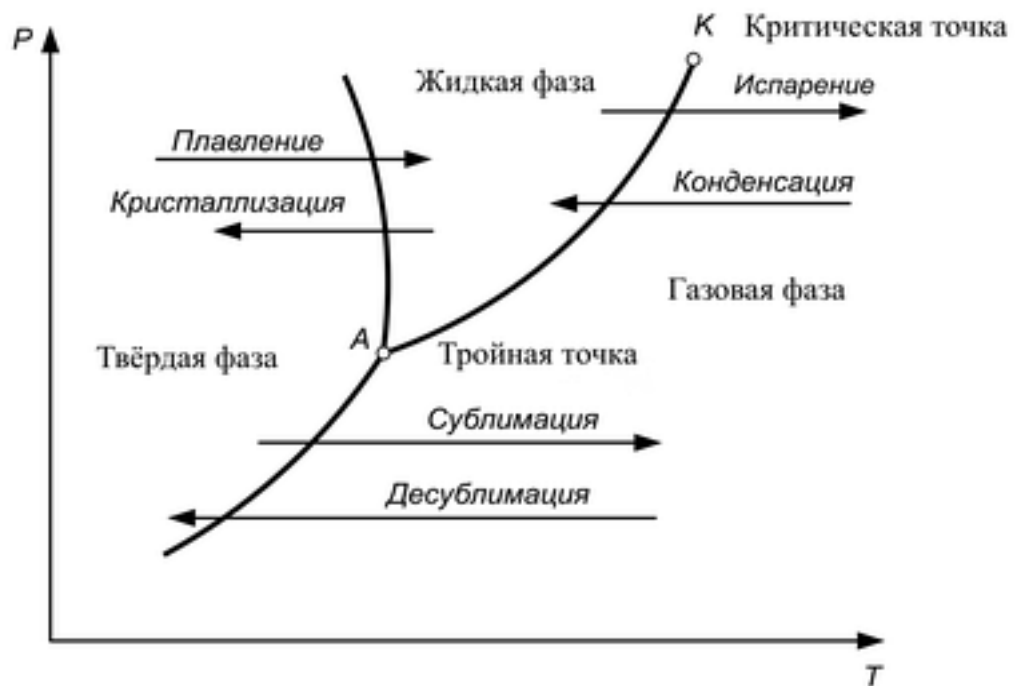


Рисунок 1.2 - Фазовые переходы первого рода на фазовой диаграмме

Таблица.1.1 - Фазовые переходы на фазовой диаграмме

		В			
		Твёрдое тело	Жидкость	Пар	Плазма
От	Твёрдое тело	-	плавление	сублимация	
	Жидкость	отвердевание (кристаллизация)	-	испарение	
	Пар	десублимация	конденсация	-	ионизация
	Плазма			рекомбинация	-

1.1.1 Фазовый переход жидкость-газ

Фазовые переходы, особенно переход между жидкой и газовой фазами, играют фундаментальную роль в различных природных и промышленных процессах. Фазовый переход жидкость-газ, также известный как испарение или конденсация, является фундаментальным процессом, при котором вещество переходит из жидкой фазы в газообразную. Переход между жидкой и газовой фазами влечет за собой значительные изменения таких величин, как плотность, теплопроводность, диффузия, энтропия, энергия. Понимание природы этих переходов имеет важное значение для многочисленных научных и промышленных применений, таких как наука и техника в области атмосферных исследований, материаловедение, экология и др. В системах «жидкость-газ» переход между фазами характеризуется очень заметными изменениями физических свойств. Теоретическая основа для понимания фазовых переходов в системах «жидкость-

газ» основана на статистической механике и термодинамике. На микроскопическом уровне поведение отдельных молекул или частиц в системе может быть описано с помощью статистической механики, которая дает представление о распределении энергий и положений частиц. Термодинамика, с другой стороны, имеет дело с макроскопическими свойствами и взаимосвязями между различными состояниями вещества. Математические методы, которые могут быть использованы для описания тепломассопереноса и фазовых переходов в различных условиях нами описаны во второй главе диссертации.

Одной из самых ранних попыток описать поведение жидкостей вблизи их критических точек было уравнение состояния Ван-дер-Ваальса. Предложенное Йоханнесом Дидериком ван дер Ваальсом в 1873 году, это уравнение включает поправки к закону идеального газа для учета межмолекулярных взаимодействий и конечного размера молекул. Уравнение Ван-дер-Ваальса служит простой моделью для понимания фазовых переходов и критических явлений в системах жидкость - газ. Это уравнение состояния расширяет закон идеального газа, включив в него немаловажный размер молекул газа и их взаимодействия, которые варьируются в зависимости от рассматриваемого вещества. Следовательно, уравнение может описывать фазовые переходы между жидким и газообразным состояниями. Кроме того, оно дает простые аналитические выражения для понимания поведения реальных веществ и представляется в виде следующей формулы:

$$p = \frac{RT}{v-b} - \frac{a}{v^2},$$

где p – это давление, T – это температура, и v - молярный объем, где $v = \frac{V}{N}$, V – это общий объем, и N – это количество молекул. $R = N_A k_B$ (универсальная газовая постоянная), N_A – константа Авогадро, и k_B – постоянная Больцмана. a - сила молекулярных взаимодействий; она имеет размерность давления, умноженную на молярный объем в квадрате. $b = \frac{B}{N}$ обозначает исключенный молярный объем, где

V - объем, исключенный из-за конечного размера молекул; это в четыре раза больше объема всех молекул.

Критические явления происходят вблизи критической точки системы «жидкость-газ», где различие между жидкой и газовой фазами становится менее выраженным. В критической точке свойства двух фаз сходятся, что приводит к уникальному поведению, такому как расходящиеся длины корреляции и критическая опалесценция. Критические явления характеризуются критическими показателями, которые описывают поведение различных термодинамических величин вблизи критической точки.

На молекулярном уровне переход из жидкости в газ включает преодоление межмолекулярных сил, удерживающих молекулы вместе в жидкой фазе. При добавлении тепла к системе молекулы приобретают кинетическую энергию, которая увеличивает их движение и ослабляет межмолекулярные силы. В конце концов, некоторые молекулы приобретают достаточно энергии, чтобы вырваться из жидкой фазы и перейти в газовую фазу, образуя пар. И наоборот, когда газ охлаждается или подвергается повышенному давлению, молекулы теряют кинетическую энергию, и межмолекулярные силы становятся доминирующими. При определенной температуре и давлении, известных, как точка конденсации, молекулы газа начинают собираться вместе, образуя жидкость. При этом процесс гомогенной нуклеации, а также свойства образовавшихся кластеров являются самостоятельными уникальными и сложными объектами исследований на базе методов квантовой химии и специальных методов математического моделирования [41-42].

1.1.2 Моделирование парообразования капель различных условиях

Проблема парообразования на поверхности капель и частиц привлекала и привлекает внимание большого числа исследователей в связи с широким распространением дисперсной базы в природе и в народном хозяйстве (атмосфера, химическая технология и т. д.)

В настоящее время имеются разнообразные результаты научных исследований, касающихся процессов фазовых переходов на каплях и частицах. Мы кратко остановимся здесь на основных проблемах и направлениях. Классическая формула для определения времени испарения капли впервые была получена Максвеллом. Она выведена при следующих предположениях: на поверхности капли давление пара равно своему равновесному значению, число Кнудсена $Kn = \frac{\lambda}{R} < 1$. Испарение происходит квазистационарно, давление насыщенного пара над поверхностью капли $P_s \ll P_0$, где P_0 – атмосферное давление. Величина P_s соответствует температуре поверхности капли $T_s < T_\infty$ (T_∞ – температура окружающей газовой среды, невозмущенной присутствием капли), которая определяется с помощью условия теплового баланса на границе капли. Допущение о квазистационарности т.е. когда время реализации $t_D = \frac{D}{R^2} \ll t_p$ значительно меньше характерного времени процесса испарения неоднократно обсуждалось в литературах [1]. Оно является достаточно оправданным при рассмотрении испарения вдали от критической точки. Другой предельный режим по числу Кнудсена, чисто кинетический $Kn \gg 1$, описывается известной формулой Герца-Кнудсена. Применимость квазистационарности для формулы Герца-Кнудсена обсуждается в работе [43]. Непосредственно из формулы Максвелла следует, что она не сможет быть использована при очень малых радиусах. Действительно, поток числа молекул пара, согласно этой формуле пропорционален $\frac{\tilde{1}}{R}$. Таким образом, при $R \rightarrow 0$ он неограниченно возрастает, что не соответствует

реальной физической картине и находится в противоречии с формулой Герца-Кнудсена. Наиболее простой выход из этого противоречия был найден Фуксом [44] и известен как метод сшивки: предполагается, что на расстояниях, меньших некоторого характерного размера $\Delta \sim \lambda$, испарение происходит как в свободномолекулярном режиме, а на расстояниях, больших Δ , как в континуальном режиме $Kn \gg 1$. Недостатком этого метода в теоретическом плане является неопределенность Δ . Вместе с тем на практике величина Δ может служить подгоночным параметром. Более точное определение Δ может быть найдено с использованием понятия скачков с положением концентраций и температуры и их определения с помощью уравнения Больцмана такой подход развит в монографии [45]. В настоящее время имеется ряд работ, посвященных построению теории испарения капель при произвольных числах Кнудсена, например, [46-52] и др. Как правило, для построения такой теории используется кинетическое уравнение Больцмана. В работах [46-47] для интеграла столкновений в уравнении Больцмана использовалась широко распространенная виду ее простоты БТК-модель [53-54]. Далее проводилась линеаризация полученного модельного уравнения и методом Лиза [52] находились потоки пара и энергии, уносимые от капли. Сравнение результатов с результатами, полученными при использовании эллипсоидальной модели (которая обладает рядом преимуществ по сравнению с БТК), показало незначительное различие между ними (в несколько процентов). В работе [51] методом пробных функций отметим, что метод подбора пробных функций достаточно эффективен при моделировании такого рода сложных и недостаточных процессов [49] проводилось интегрирование уравнения Больцмана с интегралом столкновений в форме Больцмана. В работах [50, 55] рассмотрено возникновение в слое Кнудсена потоков массы и энергии, направленных обратно по отношению к внешнему градиенту. В работе [56] поток вещества от капли вычисляется статистическим методом. В тех случаях, когда число Кнудсена лежит в пределах $10^{-2} \leq Kn \leq 0,3$ (умеренно крупные капли [57]), концентрации пара в атмосфере

для определения можно использовать для получения решений приближение континуальной среды, а на поверхности капли задавать условия, содержащие скачки концентрации и температуры [58-62].

Имеется значительное число работ, посвященных парообразованию капель в потоке. Рассматриваются илк бесотууртурные капли, в которых не учитывается внутренний массообии, ток и испарение капель с вцутронииим коивентивным переносом, Аналитические результаты получены для предельных случаев: число Пекле $P_e = \frac{U_\infty R}{D}$ (где U_∞ – скорость набегающего потока) много меньше единицы и $P_e \gg 1$. Профили скоростей при малых числах Рейнольдса $R_e \gg 1$ могут быть заданы в виде профилей скоростей Стокса и Адамара-Рыбчинского [63]. Если число Пекле $P_e \ll 1$, то наиболее эффективным является метод асимптотических сращиваний [64-59]. Если $P_e \gg 1$, то используется приближение пограничного слоя [69,70].

Довольно много исследований посвящено испарению капель и плавлению твердых частиц под воздействием электромагнитного излучения. Первые работы [71,72] изучили испарение под солнечным излучением при низких энергиях в квазистационарном режиме. В дальнейших работах исследовали лазерное воздействие, включая испарение водных капель для просветления атмосферы. Обнаружены особенности парообразования при разных энергиях. При малых потоках энергии применимы упрощённые модели [71,72], а при больших — необходимо учитывать нестационарные температурные зависимости и неоднородность энергии. Необходимо учитывать температурную зависимость коэффициентов диффузии и теплопроводности. [73]. При дальнейшем увеличении потока энергии важно учитывать неоднородность распределения поглощенной энергии, поскольку перепады температур внутри капли могут достигать сотен градусов [74]. Взрывное испарение требует газодинамических методов [75]. Современные исследования также рассматривали особенности фазового перехода на поверхности капли. В работе [79] рассмотрено возмущающее действие

электромагнитного излучения на поверхность капли. В работе [80] во введени рассмотрены уравнения для переноса массы, импульса и энергии непосредственно в приповерхностном слое жидкости, то есть, в слое толщиной порядка 100 ангстрем, который отличается по своим свойствам от объемного и является анизотропным. В нашей главе 3 особое внимание уделено в приповерхностном слое как в жидкости, так и в газе, т.е непосредственно фазовому переходу и его характерному размеру.

В работах [81,82] теоретически изучается процесс образования капель. В работе [83] исследуется величина свободной энергии как функция количества молекул, образующих каплю. В работе [84] показано, что кластеры из трёх-четырёх молекул пара могут выступать в качестве затравочных ядер для конденсации капель.

Ряд работ посвящен испарению капель растворов, что связано с наличием примесей в большинстве природных капель, а также с использованием многокомпонентных капель во многих технических приложениях. Рассматривалось испарение капель растворов, содержащих один летучий компонент [85-88], два летучих компонента или несколько летучих компонентов [89-91], испаряющихся в

диффузионном приближении, т.е. при условии $\sum_{i=1}^N P_{is} \ll P_0$ (где N – число летучих

компонентов), испарение капель растворов произвольного числа летучих компонентов с учетом потока Стефана в случае постоянных коэффициентов многокомпонентной диффузии [92]. В последнее время появились исследования, посвящённые воздействию электромагнитного поля на капли жидких кристаллов [93,94].

1.1.3 Парообразование жидких смесей из капилляров

В диссертации мы рассматриваем процессы переноса в высокодисперсных средах. Основными моделями таких сред являются сферы (рассмотренные выше) и цилиндрические капилляры [95]. Поэтому в этой параграфе остановимся на капиллярах. Изучению закономерностей испарения из одиночных капилляров посвящен ряд диссертаций, например, [94,96-97]. В них рассматриваются вопросы высокотемпературного испарения воды, испарения в неизотермических условиях, испарения бинарных растворов, интенсификации испарения в электрическом поле. Ряд работ [98-100] посвящен исследованию течения газовой смеси в капиллярах при всех числах Кнудсена. В работе [101] изучается парообразование в капиллярах методом прямого численного моделирования. В работе [102] исследуется испарение из капилляра трехкомпонентной смеси. В коллективной монографии [103] и указанной ранее монографии [95] содержатся основные теоретические результаты по парообразованию чистых жидкостей в капиллярах. В монографиях [104,105] изучаются такие чисто капиллярные эффекты как адсорбация на стенках капилляра, пленочное течение, расклинивающее давление. В указанных выше работах и в ряде других предполагается, что температура поверхности мениска T_S достаточно велика для того, чтобы пленки отсутствовали, а мениск можно было считать плоским (кривизна мениска учитывается лишь при использовании формулы Герца-Кнудсена). Такие допущения справедливы, например, для воды при $T_S \geq 70^\circ\text{C}$, а для многих органических веществ при $T_S \geq 40 - 50^\circ\text{C}$. Однако, нужно иметь в виду, что предположение о плоскости мениска несправедливо для высокопористых материалов и, как их модели, капилляров. В работе [106] методами неравновесной термодинамики изучается вопрос о применимости объемных теплофизических констант для жидкости в капилляре. Делается вывод, что ширина капилляра должна быть ≥ 15 диаметров молекул жидкости. Используя эту оценку, необходимо, однако, иметь в виду, что для применимости методов

неравновесной термодинамики должно выполняться неравенство $\frac{\bar{r}_M}{2R} \ll 1$ [92] (\bar{r}_M – среднее расстояние между молекулами, R – радиус капилляра), которое начинает выполняться со всё меньшей точностью при заданном R с увеличением температуры, те или иные аспекты проблемы парообразования и массопереноса в капиллярах рассмотрены также, например, в работах [107-113]. В нашей диссертации рассмотрены процессы переноса в электромагнитном поле. Поэтому отметим здесь результаты которые были получены для процессов диффузии в капиллярах в электромагнитном поле, диэлектрическая проницаемость в котором зависит от электрического и магнитного векторов [114].

1.1.4 Парообразование жидких смесей из пористых материалов

Испарение жидких смесей (в том числе многокомпонентных) из пористых материалов является сложным процессом, имеющим значительные приложения в различных областях, таких как химическая инженерия, экология материаловедение и др. Когда многокомпонентная жидкая смесь взаимодействует с пористым материалом, включается несколько факторов: состав смеси, свойства пористого материала, условия окружающей среды. В этом процессе пористый материал выступает в качестве среды для транспортировки жидкой смеси и последующего испарения ее компонентов. Структура и свойства пористого материала, такие как распределение пор по размерам, химический состав поверхности и пористость, влияют на транспортировку и распределение жидкой смеси внутри его пор. Кроме того, взаимодействия между компонентами жидкой смеси и поверхностью пористого материала могут влиять на скорость и степень испарения.

Испарение многокомпонентных жидких смесей из пористых материалов регулируется механизмами массопереноса, диффузии, принципами термодинамики. По мере того, как жидкая смесь проникает в пористый материал,

она подвергается фазовому разделению в зависимости от давления паров и растворимости ее компонентов. Компоненты с более высоким давлением паров, как правило, легче испаряются, что приводит к изменению состава жидкой смеси внутри пор.

На процесс испарения из пористых материалов могут влиять различные факторы, включая температуру, давление, скорость потока и присутствие других веществ в окружающей среде. Например, более высокие температуры обычно увеличивают скорость испарения, в то время как повышенное давление может подавлять испарение. Кроме того, присутствие загрязняющих веществ или конкурирующих паров может изменить характеристики испарения компонентов жидкой смеси.

Жидкая смесь, присутствующая внутри пористого материала, подвергается испарению из-за таких факторов, как температура, давление и природа пористой среды.

Процесс обычно включает в себя несколько стадий:

Транспортировка внутри пористой среды: жидкая смесь перемещается через взаимосвязанную сеть пор материала под действием капиллярных сил, силы тяжести и внешних факторов, таких как перепады давления, дополнительные силы, обусловленные, например, электромагнитным полям.

Диффузия и испарение: по мере того, как жидкая смесь проникает в поры, ее компоненты подвергаются диффузии и испарению на границе раздела жидкость-пар. Каждый компонент в смеси имеет свое собственное давление пара, которое определяет его летучесть при данной температуре.

Установление равновесия: равновесие между жидкой и паровой фазами устанавливается по мере испарения. Это равновесие определяется такими факторами, как состав жидкой смеси, температура, давление и характеристики пористой среды.

Многокомпонентные эффекты: присутствие множества компонентов в жидкой смеси может привести к сложному поведению при испарении, включая преимущественное испарение определенных компонентов, изменения состава жидкой фазы с течением времени и колебания концентраций различных компонентов в паровой фазе.

Массо- и теплоперенос: явления массо- и теплопереноса, включая конвекцию, теплопроводность и фазовый переход, играют решающую роль в процессе испарения. Эти процессы влияют на скорость и степень испарения и могут зависеть от таких факторов, как пористость, проницаемость и теплопроводность пористой среды.

1.2 Некоторые решения для вектора напряженности электрического поля

В третьей и четвертой главах мы рассматриваем методы математического моделирования, позволяющего описать процессы тепло и массопереноса, фазовые переходы в системах с нелинейными свойствами. В том числе это касается распространения электромагнитных волн в электромагнитно активных системах. Поэтому в настоящей обзорной главе остановимся кратко на решении нелинейных уравнений. Отметим, что линеаризация уравнений или даже метод возмущений расширяют решение задач, полученных в линейном приближении, но не всегда позволяют получить важные качественные эффекты. Наглядный пример неадекватности линеаризованной теории реальному явлению распространения газодинамической волны приведен, например, в монографии Уизема [114].

Поэтому в настоящее время в отечественной и зарубежной науке интенсивно разрабатываются аналитические и численные методы решения нелинейных уравнений в частных производных. В частности, большое число работ посвящено эллиптическому нелинейному уравнению $\Delta u + \lambda f(u) = 0$, заданному в

некоторой области $G \subset R^n$, т.к. это уравнение описывает разнообразные стационарные процессы, (история исследования этого уравнения восходит к работе Пуанкаре [115]). В настоящее время исследования по нелинейным уравнениям типа «диффузия-реакция» с практическими приложениями вызывают большой интерес, методы их решения описаны в работе [116]. Более поздние работы [117-134] посвящены задачам решения таких уравнений в частных производных.

С 1970-х годов активно изучаются интегрируемые нелинейные уравнения, возникающие из условия совместности переопределённой системы линейных уравнений:

$$\phi_\rho = u\phi, \quad \phi_\eta = v\phi,$$

$$u_\eta - v_\rho + [u, v] = 0$$

где u, v, ϕ – матричные комплексные функции ρ, η и комплексного спектрального параметра λ . $[*,*]$ – скобка Пуассона.

Наиболее известными из таких интегрируемых нелинейных уравнений являются, ставшие уже классическими, уравнения Кортевега-де Вриза (КгВ), Синус-Гордон (SG) и нелинейное уравнение Шредингера (НУШ). В нашей четвертой главе мы обращаемся к уравнению SG с измененным потенциалом взаимодействия для жидких сред. В работе [137] предложен общий метод получения интегрируемых нелинейных уравнений с использованием гамильтониана. Для их решения применяется метод обратной задачи рассеяния (МОЗР), подробно описанный в [138-141]. Исследования также посвящены модификациям классических интегрируемых уравнений (например, [142-151]).

Асимптотические методы получили широкое распространение, позволяя находить интегрируемые системы в асимптотическом пределе и применяться к

обыкновенным и линейным дифференциальным уравнениям в частных производных, а также к нелинейным уравнениям.

Наиболее общий теоретический подход к решению нелинейных дифференциальных уравнений изложен в монографии [152], где рассматриваются функциональные пространства и алгебры решений, а также приведены конкретные алгебры Ли для ряда таких уравнений.

В работах [153-155] точно решены уравнения Максвелла для слоистых структур с определённой поляризацией света, что позволило вывести законы дисперсии и определить физические характеристики, включая энергофлюкс вдоль волноводов. Обнаружены новые необычные свойства, обусловленные нелинейностью таких систем: нелинейные поверхностные поляритоны, "волны, захваченные пластинкой", бистабильность и т.п. (см.[154-157]).

В целом фазовые переходы, происходящие в электромагнитных полях, являются важнейшими явлениями, имеющими самые разнообразные последствия для различных научных дисциплин [158]. В контексте электромагнитных полей фазовые переходы могут проявляться различными способами, включая переходы между различными состояниями вещества (например, твердое, жидкое, газообразное), изменения в выравнивании магнитных моментов (например, из ферромагнитного в парамагнитное) или переходы между различными фазами сверхпроводников.

Численные методы конечных элементов (ЧМКЭ), решетчатая калибровочная теория (LGT) и моделирование методом Монте-Карло становятся важными инструментами для изучения фазовых переходов в электромагнитных полях. МКЭ обеспечивает высокую точность в улавливании пространственных изменений электромагнитных свойств, в то же время дает представление о поведении калибровочных полей и слабых полей и их взаимодействиях. С другой стороны, моделирование методом Монте-Карло может подходить для изучения

статистической природы фазовых переходов и их зависимости от внешних параметров.

Калибровочные поля являются своего рода "посредниками" взаимодействий между частицами в природе. Пример: Электромагнитное поле является калибровочным полем. Электроны взаимодействуют друг с другом через это поле, а его квантом является фотон. В других взаимодействиях калибровочные поля связаны с пушками (сильное взаимодействие) или бозонами W и Z (слабое взаимодействие).

1.3 Задачи типа «реакция-диффузия»

Задачи типа "Реакция-диффузия" включают моделирование динамики химических реакций и диффузии веществ в пространстве. Эти задачи распространены в различных научных областях, включая химию, биологию, физику и инженерное дело, поскольку они могут моделировать широкий спектр явлений, таких как формирование паттернов, морфогенез и динамика популяции.

В реакционно-диффузионной системе пространственное распределение химических соединений меняется с течением времени благодаря двум основным процессам: химическим реакциям и диффузии. Химические реакции изменяют концентрации веществ, в то время как диффузия приводит к распространению веществ из областей с высокой концентрацией в области с низкой концентрацией. Взаимодействие между этими процессами часто приводит к возникновению сложных пространственных паттернов и структур.

Задачи, связанные с уравнениями «реакция-диффузия» могут включать:

1. Моделирование формирования паттернов: Моделирование того, как пространственные паттерны, такие как полосы, пятна или волны, возникают в результате взаимодействий между химическими соединениями [159].
2. Морфогенез: Исследование того, как процессы реакции-диффузии способствуют развитию биологических структур и организмов, таких как формирование паттернов эмбрионов или дифференцировка тканей [160].
3. Паттерны Тьюринга: Изучение формирования самоорганизующихся паттернов, предсказанных моделью реакции-диффузии Тьюринга, которая может создавать сложные пространственные структуры без необходимости внешних сигналов [161].
4. Колебательное поведение: Изучение систем, демонстрирующих колебания концентраций химических веществ, которые могут привести к появлению синхронизированных паттернов или ритмов [162].
5. Динамика популяции: Анализ пространственного распространения популяций или видов посредством диффузии и влияния взаимодействий, таких как конкуренция или хищничество, на их распределение [163].
6. Инженерные приложения: Проектирование реакционно-диффузионных систем для химического синтеза, изготовления материалов или управления пространственным распределением веществ в микрожидкостных устройствах [164].

Задачи, связанные с моделированием процессов реакция-диффузия, часто требуют передовых математических и вычислительных методов, таких как уравнения в частных производных (PDE), численные методы решения PDE, стохастическое моделирование, методы межбассейновой кинетики и др. Эти задачи дают представление о фундаментальных принципах формирования паттернов, динамики и самоорганизации, а приложения охватывают широкий спектр дисциплин.

1.4 Выводы по главе 1

В первой главе проведены обзор и анализ современных научных подходов к моделированию процессов фазовых переходов и массопереноса в высокодисперсных системах. Основное внимание уделено фазовым переходам первого рода, таким как переход «жидкость-газ», и их особенностям при воздействии электромагнитного поля.

Особо рассмотрены процессы испарения и конденсации в каплях, капиллярах и пористых материалах. Обсуждаются методы моделирования испарения капель, включая классические формулы Максвелла и современные кинетические подходы, учитывающие влияние числа Кнудсена. Анализируются особенности фазового перехода на поверхностях капель и материалов с учётом взаимодействия с электромагнитным излучением. Важное внимание уделено влиянию температуры, давления и состава на свойства фазовых переходов.

Рассмотрены процессы испарения многокомпонентных жидкостей, взаимодействующих с пористыми материалами. Подчёркивается роль структуры пористого материала и его физических характеристик в распределении и испарении жидкостных смесей. Особое внимание уделено моделированию тепломассопереноса в сложных средах, включая задачи, связанные с равновесием фаз и массообменными процессами.

Также в главе рассматриваются основные виды решений для уравнений, описывающих электромагнитные поля в дисперсных системах. Выделены подходы к изучению нелинейных уравнений и методы решения задач типа «реакция-диффузия», которые находят применение при анализе фазовых переходов и процессов переноса.

В главе представлена классификация фазовых переходов на основе их термодинамических и механических свойств, а также обсуждаются примеры применения этих явлений в современных технологиях. Приведены ключевые

аспекты моделирования, включая использование численных методов и экспериментальных данных.

Связь главы 1 с темой диссертации определяется исследованием механизмов тепло- и массопереноса, а также фазовых переходов в условиях воздействия электромагнитного поля. Представленные в главе методы и результаты анализа закладывают фундамент для дальнейшего изучения нелинейных процессов в высокодисперсных системах. Обзор процессов испарения, конденсации и поведения жидкостных систем в капиллярных структурах формирует основу для моделирования, предложенного в следующих главах диссертации.

Обзор главы 1 используется в диссертации для обоснования выбора математических моделей и алгоритмов, применяемых для анализа фазовых переходов первого рода и индуцированных эффектов. Представленные методы позволяют учитывать сложные взаимодействия между частицами, фазами и внешними полями, что критически важно для достижения целей работы. Таким образом, глава 1 выполняет функцию базовой теоретической основы, на которой строятся модели, разработанные в последующих разделах исследования.

На основе рассмотрения и анализа большого числа работ, посвящённых тем или иным указанным выше аспектам, показано, что математическое моделирование в области тепломассопереноса и фазовых переходов в дисперсных средах является актуальным ввиду многоплановости проблем, возникающих в этой сфере.

ГЛАВА 2. МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ

В этой главе мы рассмотрим некоторые современные математические методы, которые могут быть применены для моделирования фазовых переходов.

2.1 Хаотические и динамические системы

Молекулярный фазовый переход типа «жидкость-газ» может быть описан приближённо с использованием уравнений переноса, которые в линейном приближении являются детерминистскими моделями, а непосредственно в слое фазового перехода имеет место хаотическое движение.

В общем случае динамическая система называется хаотической, если множество начальных состояний с хаотической эволюцией имеет положительную меру. Это понятие хаотической системы тесно связано с определением, которое требует положительных показателей Ляпунова. В этом случае саму систему также называют хаотической, хотя возможно сосуществование аттракторов, некоторые из которых не хаотичны. Хаотическую систему иногда называют "эффектом бабочки". Эффект бабочки описывает, как небольшое изменение в одном состоянии детерминированной нелинейной системы может привести к большим различиям в более позднем состоянии. Важной частью изучения теории хаоса является изучение математических функций, которые известны как фракталы.

Динамическая система может быть определена как детерминированное математическое предписание для развития состояния системы вперед во времени. Время здесь может быть либо непрерывной переменной, либо дискретной целочисленной переменной. Примером динамической системы, в которой время

(обозначаемое t) является непрерывной переменной, является система N уравнений первого порядка, автономных, обыкновенных дифференциальных уравнений,

$$\left. \begin{aligned} \frac{dx^{(1)}}{dt} &= F_1(x^{(1)}, x^{(2)}, \dots, x^{(N)}), \\ \frac{dx^{(2)}}{dt} &= F_2(x^{(1)}, x^{(2)}, \dots, x^{(N)}), \\ &\vdots \\ \frac{dx^{(N)}}{dt} &= F_N(x^{(1)}, x^{(2)}, \dots, x^{(N)}), \end{aligned} \right\} \quad (2.1)$$

который мы будем часто писать в векторной форме как

$$\frac{dx(t)}{dt} = F[x(t)] \quad (2.2)$$

где x — N -мерный вектор. Это динамическая система, потому что для любого начального состояния системы $x(0)$ мы можем в принципе решить уравнения для получения будущего состояния системы $x(t)$ для $t > 0$. На рисунке 2.1 показан путь, по которому идут в систему, как она развивается с течением времени в случае, где $N = 3$. Пространство $(x^{(1)}, x^{(2)}, x^{(3)})$ на рисунке называется фазовым пространством, а путь в фазовом пространстве, за которым следует система, поскольку она развивается со временем, называется орбитой или траекторией. Кроме того, принято называть динамическую систему непрерывного времени потоком.

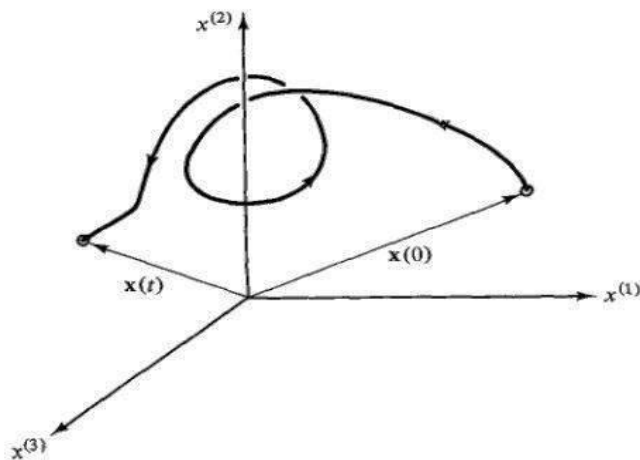


Рисунок 2.1 - Орбита в трехмерном ($N = 3$) фазовом пространстве.

В случае дискретного, целочисленного времени (обозначающим переменную времени его моментами, $n = 0, 1, 2, \dots$), примером динамической системы является карта, которую мы пишем в векторной форме как

$$x_{n+1} = M(x_n) \quad (2.3)$$

где x_n имеет N компонентов, $x_n = (x^{(1)}, x^{(2)}, \dots, x^{(N)})$. При заданном начальном состоянии x_0 , получаем состояние в момент времени $n = 1$ по $x_1 = M(x_0)$. Определив x_1 , можно затем определить состояние при $n = 2$ по $x_2 = M(x_1)$, и так далее. Таким образом, при заданном начальном условии x_0 мы генерируем орбиту (или траекторию) дискретной системы времени: x_0, x_1, x_2, \dots . Непрерывная временная система размерности N часто может быть с пользой сведена к дискретной временной карте размерности $N - 1$ с помощью метода Пуанкаре поверхности сечения.

Сложность возможной структуры орбит может быть больше при большей размерности системы, в данном случае, $N \geq 3$.

В обычном употреблении "хаос" означает "состояние беспорядка". Математическое определение хаоса, первоначально сформулированное Робертом Л. Девейниб говорит, что для классификации динамической системы как хаотической она должна обладать такими свойствами:

1. Она должна быть чувствительна к первоначальным условиям,
2. Она должна быть топологически транзитивным,
3. Она должен иметь плотные периодические орбиты.

Для описания поведения системы могут использоваться карты, которой называется функция, у которой входное и выходное пространства совпадают.

Пусть x — точка, а f — карта. Орбита x под f — это множество точек $\{x, f(x), f^2(x), \dots\}$. Начальная точка x для орбиты называется начальным

значением орбиты. Точка p является фиксированной точкой карты f , если $f(p) = p$.

Пусть f – отображение на R , если p – это вещественное число, для которого выполняется равенство $f(p) = p$, то оно называется неподвижной точкой. Если точки, близкие к p , притягиваются к нему, то p является стоком (притягивающей неподвижной точкой).

Если же близкие к p точки отталкиваются от него, то p называется источником (отталкивающей неподвижной точкой).

Если $|f'(p)| < 1$, то p – сток,

Если $|f'(p)| > 1$, то p – источник.

Точка p – периодической точкой периода k , если $f^k(p) = p$ и k – наименьшее положительное целое число, удовлетворяющее этому условию. Орбита, начинающаяся в p и состоящая из k точек, является периодической орбитой периода k .

Пусть f – отображение и предположим, если p является стоком для отображения f^k , то её орбита также считается периодической.

Периодическая орбита $[p_1, \dots, p_k]$ является стоком, если $|f'(p_k) \dots f'(p_1)| < 1$, и источником, если $|f'(p_k) \dots f'(p_1)| > 1$.

Тип неподвижной точки, которая не может возникнуть в одномерном пространстве состояний-седло, имеет по крайней мере одно направление притяжения и по крайней мере одно направление отталкивания. Седловидная неподвижная точка неустойчива.

Отображение $A(v)$ линейно, если для каждого $a, b \in \mathbb{R}$. Каждая линейная карта имеет фиксированную точку в начале координат. Число λ является собственным значением матрицы A , если существует ненулевой вектор v , такой что $Av = \lambda v$ и этот v называется собственным вектором. Например : $A = \begin{pmatrix} 1 & 3 \\ 2 & 2 \end{pmatrix}$,

$\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ – собственный вектор, собственное значение равно 4. Имеет место следующая теорема:

Теорема. Пусть $A(v)$ – линейное отображение на \mathbb{R}^m , которое представлено матрицей A (в некоторой системе координат). Тогда:

1. Начало координат является стоком, если все собственные значения отображения A меньше 1 по абсолютной величине;
2. Начало координат является источником, если все собственные значения отображения A больше 1 по абсолютной величине.

Отображения A является **гиперболическим отображением**, если A не имеет собственных значений по абсолютной величине, равных единице. Если гиперболическое отображение A имеет по крайней мере одно собственное значение по абсолютной величине больше единицы и по крайней мере одно собственное значение по абсолютной величине меньше единицы, то начало координат является седлом.

Для характеристики точек используются матрица Якоби. Матрица Якоби

определяется так: $Df(p) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1}(p) & \dots & \frac{\partial f_1}{\partial x_m}(p) \\ \vdots & \dots & \vdots \\ \frac{\partial f_m}{\partial x_1}(p) & \dots & \frac{\partial f_m}{\partial x_m}(p) \end{pmatrix}$. Устойчивость равновесия,

часто определяется якобиана векторного поля, а именно:

1. Если величина каждого собственного значения $Df(p)$ меньше 1, то p – сток.
2. Если величина каждого собственного значения $Df(p)$ больше 1, то p является источником.
3. Если ни одно из собственных значений $Df(p)$ не имеет величины 1, то p – гиперболическая. Если p гиперболическое и если хотя бы одно собственное значение $Df(p)$ имеет величину больше 1 и хотя бы одно собственное значение имеет величину меньше 1, то p называется седлом.

Для характеристики хаотичности поведения системы используется числа Ляпунова.

Число Ляпунова — средняя скорость расхождения близких точек вдоль траектории системы за один шаг, а показатель Ляпунова - натуральный логарифм числа Ляпунова. Хаос определяется показателем Ляпунова, большим нуля. Показатели Ляпунова описывают, как эволюция, начинающаяся бесконечно близко к x , расходится со временем.

Показатель Ляпунова - чувствительность нелинейных динамической системы к малым изменениям начальных условий. Они используются для идентификации хаоса. Если две орбиты начинаются близко друг к другу в хаотической системе, то они будут стремиться удаляться друг от друга экспоненциально. Пусть f — гладкое отображение действительной прямой \mathbb{R} . Число Ляпунова $L(x_1)$ орбиты $\{x_1, x_2, x_3, \dots\}$ определяется как [166]:

$$L(x_1) = \lim_{n \rightarrow \infty} (|f'(x_1)| \dots |f'(x_n)|)^{\frac{1}{n}},$$

если этот предел существует. Показатель Ляпунова $h(x_1)$ определяется как [166]

$$h(x_1) = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\frac{1}{n} \right) [\ln|f'(x_1)| + \dots + \ln|f'(x_n)|],$$

если этот предел существует. Заметим, что h существует тогда и только, когда L существует и не равен нулю, а $\ln L = h$. Если $f'(x_n) = 0$, то показатель Ляпунова не определен.

Нелинейные карты имеют более одного аттрактора.

Для карты на \mathbb{R}^m каждая орбита имеет m чисел Ляпунова, измеряющих скорости отхода от текущей точки орбиты в m ортогональных направлениях, определяемых динамикой карты. Первое направление — это то, в котором расстояние между соседними точками максимальное. Второе направление выбирается из всех перпендикулярных первому и имеет наибольшее расстояние, а третье — из направлений, перпендикулярных первым двум, и так далее.

Существует связь между показателями Ляпунова и фрактальной размерностью типичного хаотического аттрактора. Было предложено определение измерения, для этой связи, называемое **измерением Ляпунова**.

$$D_L = \begin{cases} 0 & \text{если } p \text{ не существует} \\ p + \frac{1}{|h_{p+1}|} \sum_{i=1}^p h_i & \text{if } p < m \\ m & \text{if } p = m \end{cases}$$

Для двумерной карты (карта Хенона и двумерная карта Бейкера) $D_L = 1 + \frac{h_1}{|h_2|}$. Если вставить показатели Ляпунова, то получим: $D_L = 1 + \frac{\ln 2}{\ln 3}$.

Отметим, что естественная мера карты не атомарна, если существует хаотический аттрактор. Существование естественной меры позволяет вычислять величины, которые отбираются и усредняются по бассейну притяжения, и эти величины должны быть четко определены. Мера атомарная, если вся мера содержится в конечном или счетном бесконечном множестве точек.

2.2 Хаос в гамильтоновых системах

Хаотические решение могут возникать в системах, моделью которых являются гамильтоновы динамические нелинейные уравнения. В этом случае предполагается, что моделируются процессы, в которых отсутствует диссипация. Гамильтонова динамика моделирует очень большой круг явлений.

Она включает в себя не только известный случай механических систем при отсутствии трения, но и множество других задач, таких как траектории, по которым следуют линии магнитного поля в плазме, смешение жидкостей и лучевые уравнения, описывающие траектории распространения волн. Во всех этих ситуациях возникновение хаоса может быть важным вопросом.

Динамика гамильтоновой системы задаётся гамильтонианом $H(p_i, q_i, t)$, где p_i — обобщённый импульс и q_i — обобщённая координата, $i = 1, 2, \dots, N$.

Векторные уравнения Гамильтона определяют траекторию $(\mathbf{P}(t), \mathbf{Q}(t))$, по которой следует система в $2N$ – мерном фазовом пространстве, и задаются [167]:

$$\left. \begin{aligned} \frac{d\mathbf{P}}{dt} &= -\frac{dH(\mathbf{P}, \mathbf{Q}, t)}{d\mathbf{Q}} \\ \frac{d\mathbf{Q}}{dt} &= \frac{dH(\mathbf{P}, \mathbf{Q}, t)}{d\mathbf{P}} \end{aligned} \right\} \quad (2.4)$$

В частном случае, когда гамильтониан не имеет явной временной зависимости $H = H(\mathbf{P}, \mathbf{Q})$, можно использовать уравнения Гамильтона, чтобы показать, что, хотя \mathbf{P} и \mathbf{Q} меняются со временем, значение $H(\mathbf{P}(t), \mathbf{Q}(t))$ остается постоянным [167]:

$$\frac{dH}{dt} = \frac{d\mathbf{Q}}{dt} \cdot \frac{dH}{d\mathbf{Q}} + \frac{d\mathbf{P}}{dt} \cdot \frac{dH}{d\mathbf{P}} = \frac{dH}{d\mathbf{P}} \cdot \frac{dH}{d\mathbf{Q}} - \frac{dH}{d\mathbf{Q}} \cdot \frac{dH}{d\mathbf{P}} = 0$$

Значение гамильтониана связано с энергией E системы, $H(\mathbf{P}, \mathbf{Q}) = E$ является постоянным. Можно переписать систему (2.4) в виде:

$$\frac{d\mathbf{X}}{dt} = F(\mathbf{X}, t), \quad (2.5)$$

принимая \mathbf{X} как $2n$ – мерный вектор, $\mathbf{X} = \begin{pmatrix} \mathbf{P} \\ \mathbf{Q} \end{pmatrix}$ и принимая $F(\mathbf{X})$ как

$$F(\mathbf{X}, t) = S_N \cdot \frac{dH}{d\mathbf{X}}, \quad (2.6)$$

где

$$S_N = \begin{bmatrix} 0_N & -I_N \\ I_N & 0_N \end{bmatrix} \quad (2.7)$$

S_N – симплектическая матрица, I_N – N – мерная матрица тождества, 0_N – тогда $N \times N$ матрица нулей, и, следовательно

$$\frac{dH}{d\mathbf{X}} = \begin{bmatrix} \frac{dH}{dp} \\ \frac{dH}{dq} \end{bmatrix} \quad (2.8)$$

Одним из основных свойств уравнений Гамильтона является то, что они сохраняют $2N$ – мерные объемы в фазовом пространстве.

Действительно, для дивергенции \mathbf{F} можно записать:

$$\frac{d}{dx} \cdot \mathbf{F} = \frac{d}{dp} \cdot \left(-\frac{dH}{dq} \right) + \frac{d}{dq} \cdot \left(\frac{dH}{dp} \right) = 0 \quad (2.9)$$

Тогда первоначальная замкнутая поверхность в $2N$ – мерном фазовом пространстве S_0 эволюционирует в каждый момент времени t в новую замкнутую поверхность S_t , которая содержит точно такой же $2N$ – мерный объем, как S_0 [167].

Эта несжимаемость объемов фазового пространства для гамильтоновых систем представляет собой теорему Лиувилля.

Основное структурное свойство уравнений Гамильтона является то, что они симплектичны. То есть, если рассмотреть три орбиты, которые бесконечно мало смещены друг относительно друга $(\mathbf{P}(t), \mathbf{Q}(t))$, $(\mathbf{P}(t) + d\mathbf{P}(t), \mathbf{Q}(t) + d\mathbf{Q}(t))$ и $(\mathbf{P}(t) + d\mathbf{P}'(t), \mathbf{Q}(t) + d\mathbf{Q}'(t))$, где $d\mathbf{P}, d\mathbf{Q}, d\mathbf{P}'$ и $d\mathbf{Q}'$ – бесконечно малые N векторов, то величина

$$d\mathbf{P} \cdot d\mathbf{Q}' - d\mathbf{Q} \cdot d\mathbf{P}'$$

которая называется дифференциальной симплектической областью, не зависит от времени [167].

В 1882 году французский математик А. Пуанкаре открыл явление динамического хаоса в гамильтоновых системах, но это осталось незамеченным. В 1963 году американский метеоролог Э. Н. Лоренц обнаружил детерминированный хаос, изучая систему трёх нелинейных уравнений для метеорологии [2, 8].

Э. Н. Лоренц доказал невозможность долгосрочных метеорологических прогнозов из-за погрешностей измерительных приборов, что мешает получению точных начальных данных. Кроме того, ограниченные ресурсы компьютеров

приводят к накоплению вычислительных погрешностей, особенно при прогнозировании на более поздние моменты времени. В нелинейных динамических системах, характеризующихся хаосом, решения с исходными погрешностями могут существенно отличаться от реальных. Эту чувствительность к начальным данным Лоренц назвал эффектом бабочки [8].

Детерминированный или динамический хаос – это хаотическое движение нелинейной системы, строго зависящее от начальных условий и подчиняющееся определённым законам [165, 166]. Детерминированный хаос может возникать в нелинейных системах тремя способами его возникновения:

Каскад бифуркаций или последовательность Фейгенбаума – это первый путь, открытый Митчеллом Фейгенбаумом. Он изучал рекурсивные соотношения вида:

$$x_{n+1} = \lambda f(x_n) \quad (2.10)$$

График рекурсивной функции (2.10) колеблется между неподвижными точками, количество которых удваивается при определённом значении внешнего параметра λ , что и называется бифуркацией (от латинского «bis» и «furca» — вилы с двумя зубцами). Эти колебания продолжаются, пока число неподвижных точек не становится бесконечным, приводя к детерминированному хаосу [20, 24].

Чередование – второй путь к хаосу — это смена регулярного и хаотического движений, где хаос проявляется всплесками и подчиняется статистическим законам [20, 166].

Странный аттрактор – третий путь, приводящий к хаосу в диссипативных системах, связан с появлением странного аттрактора — сложной структуры в фазовом пространстве, сформированной для двух- или трёхмерного представления

системы [10]. Пересекая неустойчивости, фазовые траектории начинают достигать конечной области нулевого объёма, что приводит к хаотическому движению.

Детерминированный хаос также возникает в консервативных системах, где движение в фазовом пространстве может быть как регулярным, так и нерегулярным, согласно теореме КАМ (Колмогорова—Арнольда—Мозера). В 1954 году А. Н. Колмогоров сформулировал теорему, утверждающую, что движение в фазовом пространстве гамильтоновой системы не полностью регулярное или нерегулярное. Позже В. И. Арнольд и Ю. К. Мозер доказали её, и она стала известна как теорема КАМ. Такие системы описывают процессы, как движение трёх тел в космосе, орбиты спутников и астероидов, и движение частиц в ускорителях. На основании сказанного выше можно привести схему классификация (рис. 2.2).

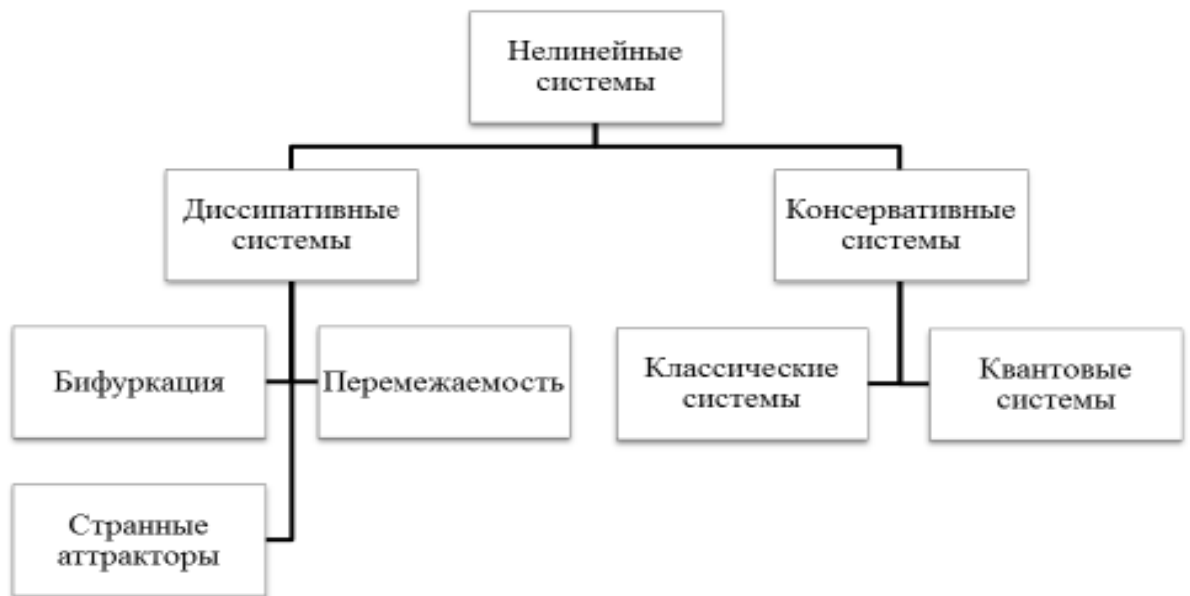


Рисунок 2.2 - Схема классификации нелинейных систем

Функция Гамильтона выбирается в зависимости от задачи, например в соответствии от силовых воздействий на частицу или элемент объёма.

Однако, можно рассмотреть и достаточно общий подход для нахождения потенциальной части гамильтониана [28].

Пусть Φ – конечное множество, Ω -измеримое пространство, состоящее из функций $\varphi = \{\varphi(x)\}$ на d -мерной решетке. Это конфигурация системы. Ограничение φ равно $\varphi(V)$ и $\varphi(V) = \{\varphi(x): x \in V\}$. В этом случае $\Omega(V)$ будет пространством всех возможных $\Phi(V)$.

Пусть потенциал $\xi(\varphi(V)): \Omega(V) \rightarrow R^1$ является функцией каждого непустого конечного подмножества $V \subset Z^d$. При бинарном взаимодействии $\xi(\varphi(V))$ не равно нулю и $|V| = 2$, тогда для любого $V = (x', x'')$ имеет место ограничение [27]:

$$|\xi(\varphi(x'), \varphi(x''))| \leq \frac{const}{\|s' - s''\|^{\alpha d}}, \alpha > 1.$$

Радиус взаимодействия можно найти из условия $\xi(\varphi(V)) = 0$, при $V > R$. Если такое условие не выполняется при конечном R , то $R \rightarrow \infty$.

Если Φ не компактно и взаимодействие имеет конечный радиус, то ряды в U могут расходиться из-за увеличения переменной φ на бесконечности, где U – суммирование всех конечных множеств V .

Для любого конечного подмножества W

$$H(\varphi(W)) = \sum_{V \subseteq W} \xi(\varphi(V))$$

где $H(\varphi(W))$ – энергия конфигурации φ в объеме W .

Суммирование $H(\varphi(W) | \varphi(Z^d - W)) = \sum_{\substack{V \cap W \neq \emptyset \\ V \cap (Z^d - W) = \emptyset}} \xi(\varphi(V))$ даёт

энергию взаимодействия между $\varphi(W)$ и конфигурацией $\varphi(Z^d - W)$. В этом случае

Φ компактен [27]. Величина $H(\varphi(W)) + H(\varphi(W) | \varphi(Z^d - W))$ является энергией конфигурации $\varphi(W)$ при граничном условии $\varphi(Z^d - W)$. Соответственно получается гамильтонов ряд [27]:

$$H(\varphi) = \sum_{V \subset Z^d} \xi(\varphi(V)) = \sum_{x \in Z^d} U(\varphi(x); \varphi(y), y \neq x)$$

где первое суммирование происходит для всех непустых подмножеств $V \subset Z^d$. Некоторые примеры гамильтонианов приведение в приложении 1.

Зная величину H , можно найти распределение вероятностей различных объектов: частиц, молекул и другие. При заданном граничном условии можно использовать условное распределение Гиббса.

Условное распределение Гиббса в объеме V при граничном условии $\varphi(Z^d - V)$ представляет собой распределение вероятностей на пространстве $\Omega(V)$ конфигураций $\varphi(V)$, плотность которого по мере $\prod_{s \in V} d\chi(\varphi(s))$ имеет следующий вид [27]:

$$p(\varphi(V) | \varphi(Z^d - V)) = \frac{\exp\{-H_v(\varphi)\}}{\Theta},$$

$$H_v(\varphi) = H(\varphi(V)) + H(\varphi(V) | \varphi(Z^d - V))$$

Для конечного радиуса взаимодействия или компактного пространства Φ энергия конфигурации φ в объеме V , обозначаемая как $H_v(\varphi)$ имеет значение для любой конфигурации $\{\varphi(x), x \in Z^d\} \in \Omega$. Θ – нормирующий множитель.

Если $V_1 \subset V_2$, и конфигурации $\varphi(V_1), \varphi(V_2 - V_1), \varphi(Z^d - V_2)$, то

$$p(\varphi(V_1) | \varphi(Z^d - V_1)) = \frac{p(\varphi(V_2) | \varphi(Z^d - V_2))}{p(\varphi(V_2 - V_1) | \varphi(Z^d - V_2))}$$

Соответственно, распределение вероятности для конфигурации $\varphi(V_1)$ определяется с помощью гамильтониана $H(\varphi(V_2))$.

2.3 Виды энтропии

Для характеристики степени хаотичности важнейшей величиной является энтропия. Соответственно, информация является мерой упорядоченности.

Имеется несколько подходов к определению энтропии.

Энтропия Колмогорова – Синая (КС) - Энтропия КС обобщает концепцию энтропию, известную из теории вероятностей (и первоначально из термодинамики). Энтропия Колмогорова – Синая (КС) измеряет хаотический характер динамических систем. Её значение равно нулю для хаотических отображений, таких как вращения. Ее также называют метрической энтропией или, для краткости, энтропией КС.

Пусть имеется вероятностное пространство и отображение, сохраняющее меру, $(X, \Sigma, P)f: X \rightarrow X$.

В теории вероятностей энтропия разбиения определяется как [168]

$$H(Q) = - \sum_{i=1}^r P(Q_i) \log P(Q_i),$$

Где $Q(X) = Q_1 \cup Q_2 \dots \cup Q_r$. Энтропия по отношению к разбиению Q и функции f может быть представлена в виде [168]:

$$h(f, Q) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} H \left(\bigvee_{n=0}^N f^{-n} Q \right),$$

в котором

$$\bigvee_{n=0}^N f^{-n}Q = \{Q_{i_0} \cap f^{-1}Q_{i_1} \cap \dots \cap f^{-N}Q_{i_N}, \quad P(Q_{i_0} \cap f^{-1}Q_{i_1} \cap \dots \cap f^{-N}Q_{i_N})\}$$

Энтропия Колмогорова-Синая сохраняющего меру отображения определяется как супремум по всем разбиениям Q :

$$h(f) = \sup_Q h(f, Q)$$

КС-энтропия — это максимальный из характеристических показателей Ляпунова, позволяющих судить о скорости, с которой утрачивается информация о начальном состоянии.

Энтропия Колмогорова (К – энтропия) является ключевой характеристикой хаотического движения в фазовом пространстве любой размерности. Она пропорциональна скорости утраты информации о состоянии динамической системы со временем и связана с термодинамической энтропией S , отражающей уровень беспорядка в системе. Например, в системе газовых молекул, помещенных в одну половину куба, при открытии всего объема степень беспорядка увеличивается, поскольку молекулы получают больше свободы для движения. Увеличение беспорядка также наблюдается при фазовом переходе «жидкость-газ». Более строго, энтропия S определяется как [168]:

$$S \sim -\sum_i P_i \ln P_i, \quad (2.11)$$

где P_i — вероятность для системы оказаться в состоянии i . Иначе, P_i есть мера информации, необходимой для определения нахождения системы в некотором состоянии i . К – энтропия тем больше, чем быстрее разбегаются траектории, т.е. тем больше нестабильность траекторий и система более хаотична.

Энтропия Шеннона. Формально энтропия Шеннона совпадает с формулой (2.11):

$$H(\{q_i\}) = -\sum_{i=1}^n q_i \log q_i, \quad (2.12)$$

где q_i – вероятности, соответствующие некоторому распределению вероятностей, логарифм обычно берут по основанию 2, т.к. бит является единицей информации.

Здесь дискретная величины X имеет распределение вероятностей $q = \{q_x\}$. Энтропия связана с передачей информации I по каналу с пропускной способностью $C = \max_{q(X)} I(X; N(X))$.

Здесь максимум берется по всем вероятностным распределениям на входах X в канал, а $N(X)$ является выходом канала, заданного входным сигналом X . Общая информация I определяется как [168]:

$$\begin{aligned} I(X; Y) &= H(Y) - H(Y|X) = \\ &= H(X) + H(Y) - H(X, Y), \end{aligned}$$

где $H(X, Y)$ является энтропией совместного распределения X и Y , $H(Y|X)$ условная энтропия величины Y при заданном X , то есть, если $\{X_i\}$ – возможные значения X , тогда условная энтропия равна [168]:

$$H(Y|X) = \sum_i P(X = X_i) H(Y|X = X_i)$$

Энтропия фон Неймана. В квантовой статистической механике энтропия фон Неймана, является расширением классических концепций энтропии Гиббса. Для квантовомеханической системы, описываемой матрицей плотности ρ , энтропия фон Неймана равна [168]:

$$S(\rho) = -tr(\rho \ln \rho) \quad (2.13)$$

Если ρ записывается через собственные векторы (конечномерное матричное представление):

$$\rho = \sum_j \eta_j |i\rangle\langle j|,$$

то энтропия фон Неймана представляется в виде [168]:

$$-\sum_j \eta_j \ln \eta_j, \quad (2.14)$$

В этой форме S можно рассматривать как теоретическую информационную энтропию Шеннона. Поскольку для чистого состояния матрица плотности идемпотена, то энтропия $S(\rho)$ для нее обращается в нуль. Таким образом, если система конечна, то энтропия $S(\rho)$ кодирует степень смешения состояния, описывающего данную систему.

Энтропия Гиббса и энтропия Больцмана - В статистической термодинамике наиболее общей формулой для энтропии S термодинамической системы является энтропия Гиббса,

$$S = -k_B \sum p_i \ln p_i$$

где k_B – постоянная Больцмана, а p_i – вероятность нахождения системы в микросостоянии i .

Людвиг Больцман был первым, кто установил связь между термодинамикой и теорией информации, выразив ее в своем знаменитом уравнении [168]:

$$S = k_B \ln(W), \quad (2.15)$$

Где S – термодинамическая энтропия конкретного макросостояния, W – число микросостояний (различных комбинаций частиц в различных энергетических состояниях). Каждое микросостояние равно вероятно, и его вероятность $p_i = \frac{1}{W}$. Подставляя это в формулу энтропии Гиббса, получаем уравнение Больцмана.

Из (2.15) следует непосредственная связь между энтропией и числом возможных микросостояний системы. Добавление тепла увеличивает термодинамическую энтропию системы, так как возрастает число возможных её микросостояний, согласующихся с макропараметрами.

2.4 P –адические числа

В настоящее время p -адический анализ применяется в различных областях: непосредственно в теории чисел, криптографии динамических системы, квантовой теории, теории мышления [169] и др [170-175]. В данном параграфе остановимся на основных понятиях p -адических чисел. P -адические числа были введены в 1904 году немецким математиком К. Хензелем. P -адические числа — это расширение поля рациональных чисел, построенное на основе делимости целых чисел на простое число p . Это расширение выполняется в соответствии с p -адической нормой. Пусть X — непустое множество, тогда функция d , определённая на множестве упорядоченных пар (x, y) , где (x, y) являются элементами, и присваивает неотрицательные действительные значения $d(x, y)$, называется расстоянием или метрикой на X , если она удовлетворяют следующим свойствами:

1. $d(x, y) = 0$ тогда и только, когда $x = y$;
2. $d(x, y) = d(y, x)$;
3. $d(x, y) \leq d(x, z) + d(z, y)$ для всех $z \in X$.

X может допускать множество различных структур метрического пространства (X, d) . Обычно множество X рассматривается как поле.

Заполнение поля \mathbb{Q} по p -адической норме образует поле \mathbb{Q}_p . Поле \mathbb{Q}_p аналогично $\mathbb{R} = \mathbb{Q}_\infty$ вещественным числам, полученным путем сложения \mathbb{Q} в соответствии норме $|x| = |x|_\infty$.

Любое p -адическое число $x \neq 0$ однозначно представлено в канонической форме [169]:

$$x = p^\gamma (x_0 + x_1 p + x_2 p^2 + \dots),$$

где $\gamma = \gamma(x) \in \mathbb{Z}$ и x_j — целые числа, $0 \leq x_j \leq p - 1, x_0 > 0 (j = 0, 1, \dots)$

Отметим, что ряд сходится по норме $|x|_p$, поскольку общий член его имеет оценку [169]:

$$|p^\gamma x_j p^j|_p \leq p^{-\gamma-j}, j = 0, 1, \dots$$

Пусть $p =$ простое число, $p = 2, 3, 5, \dots, 137, \dots$. В поле \mathbb{Q}_p вводится другая норма $|x|_p$ в соответствии с правилом [169]:

$$|0|_p = 0, |x|_p = p^{-\gamma(x)},$$

Целое число $\gamma(x)$ определяется из представления [170]:

$$x = p^\gamma \frac{m}{n}, m, n, \gamma = \gamma(x) \in \mathbb{Z}$$

И целые числа m и n не делятся на p . p -адической нормой называется норма $|x|_p$.

Нормой называется отображение, обозначаемое через $|\cdot|$, поля F в множество неотрицательных вещественных чисел, такое, что:

1. $|x| = 0$ когда $x = 0$;
2. $|x \cdot y| = |x| \cdot |y|$;
3. $|x + y| \leq |x| + |y|$.

Метрика d определяется соотношением $d(x, y) = |x - y|$. Норма $|x|_p$ обладает характеристическими [170]:

1. $|x|_p \geq 0$, причем $|x|_p = 0 \Leftrightarrow x = 0$,
2. $|xy|_p = |x|_p |y|_p$,
3. $|x + y|_p \leq \max(|x|_p, |y|_p)$.

В случае, когда $|x|_p \neq |y|_p$, имеет место равенство

$$\text{a) } |x + y|_p = \max(|x|_p, |y|_p).$$

При $p = 2$ можно записать:

$$\text{b) } |x + y|_2 \leq \frac{1}{2} |x|_2. \text{ Если } |x|_2 = |y|_2.$$

Рассмотрим пространство \mathbb{Q}_p . В таком пространстве верно:

$$|x + y|_p \leq \max(|x|_p, |y|_p) \leq |x|_p + |y|_p, x, y \in \mathbb{Q}_p,$$

Поэтому \mathbb{Q}_p можно ввести метрику:

$$p(x, y) = |x - y|_p.$$

При этом \mathbb{Q}_p становится полным метрическим пространством. При работе с натуральными числами, если p является фиксированным простым числом, то любое положительное целое число может быть записано как расширение базового p в виде [169]:

$$\sum_{i=0}^n a_i p^i, \tag{2.16}$$

где a_i – это целые числа в $\{0, \dots, p - 1\}$. Например, двоичное расширение 35 равно $1 \times 2^5 + 0 \times 2^4 + 0 \times 2^3 + 0 \times 2^2 + 1 \times 2^1 + 1 \times 2^0$, обычно записанное в сокращенной записи 100011_2 .

Бесконечные суммы с p -адическими числами вида:

$$\sum_{i=k}^n a_i p^i, \quad (2.17)$$

где k – некоторое целое число (не обязательно положительное), и каждый коэффициент a_i можно назвать p -адической цифрой. При таком подходе мы получаем p -адические разложения p -адических чисел. т.е p -адические числа, для которых $a_i = 0$ для всех $i < 0$, также называются p -адическими целыми числами. Пополняя множество рациональных чисел до полных метрических пространств, можно построить различные числовые поля. Среди таких полей только поле действительных чисел R является архимедовым метрическим пространством, для которого справедлива аксиома Архимеда: если имеются две величины A и B , и A меньше B , то взяв A слагаемым достаточное число раз, можно превзойти B . Для других полей \mathbb{Q}_p где p пробегает множество простых чисел эта аксиома может не выполняться и эти поля не являются архимедовыми. Более точный результат даётся теоремой Островского: каждое нетривиальное абсолютное значение на рациональных числах Q эквивалентно либо обычному действительному значению, либо p -адическому абсолютному значению.

Абсолютное значение на рациональных числах является стандартным абсолютным значением:

$$|x| = \begin{cases} x, & x \geq 0 \\ -x, & x < 0 \end{cases}.$$

Если p -простое число, то p -адическое абсолютное значение на \mathbb{Q}_p определяется следующим образом:

$$|x|_p = \begin{cases} 0, & x = 0 \\ p^{-n}, & x \neq 0 \end{cases},$$

где x – любое ненулевое рациональное и оно может быть представлено в виде $x = p^n \frac{a}{b}$, где a и b взаимно простые целые числа, которое не делится на p , n – целое число.

Для p -адического анализа справедливы следующие утверждения [171]:

1. Все треугольники равнобедренные.
2. Любая точка шара $d(a, r) = \{x \in \mathbb{Q}_p : |x - a|_p \leq r\}$ является центром. Граница шара пуста. Два шара либо не пересекаются, либо один содержится в другом.
3. Если $p_1 \neq p_2$, то $|\cdot|_{p_1} \not\sim |\cdot|_{p_2}$ каждое простое число p порождает свое собственное поле p -адических чисел \mathbb{Q}_p .
4. $x^2 = -1$ разрешимо тогда и только тогда, когда $p = 1 \pmod{4}$,
5. Последовательность $\{x_n\}$ в \mathbb{Q}_p является последовательностью Коши Тогда и только тогда, когда $|x_{n+1} - x_n|_p \rightarrow 0$ при $n \rightarrow \infty$.
6. Ряд $\sum_{n=1}^{\infty} a_n < \infty$, сходится, если и только если $a_n \rightarrow 0$.
7. $|x||x|_p = 1$
8. Уравнение разрешимо над рациональными числами тогда и только тогда, когда оно разрешимо над вещественными числами и p -адическими числами для каждого простого p .

Применение тех или иных указанных свойств и результатов позволяет применять p -адический анализ в различных областях. Так, например, использование p -адических чисел может быть применено при моделировании флуктуаций топологии, размерности пространства – времени близи планковский

длины [176], при моделировании хаотических структур, моделировании процессов в поле сложных потенциалов и др.

Для p -адических чисел имеет место несвязная топология: всякое связное множество состоит из одной точки. Соответственно, иерархическая структура определяется итеративной системой функций, что приводит к тому, что p -адические числа соотносятся с делимостью (как было показано выше на примере модуля).

При рассмотрении непрерывных p -адических функций может быть использован подход Малера: рассмотрение p -адических функций в терминах многочленов. Тогда для полиномиальных функций $f(x)$ справедлив ряд Ньютона:

$$f(x) = \sum_{k=0}^{\infty} (\Delta^k f)(0) C_x^k$$

где C_x^k — число сочетаний, $C_x^k = \frac{x!}{(x-k)!k!}$, $\Delta^k f$ — k -тая разность, $(\Delta f)(x) = f(x+1) - f(x)$.

2.5 Методы моделирования с применением теории перколяции

Перколяция (по английски — percolation) обозначает протекание. В теории перколяции распространены решеточные задачи — задачи узлов и связей.

В бесконечной квадратной сетке узлы — это точки пересечения линий, а линии — это связи. Кластером называют цепочку связанных объектов (например, черных квадратов). Если кластер соединяет противоположные стороны системы, он считается перколяционным, бесконечным, сжимающим или соединяющим.

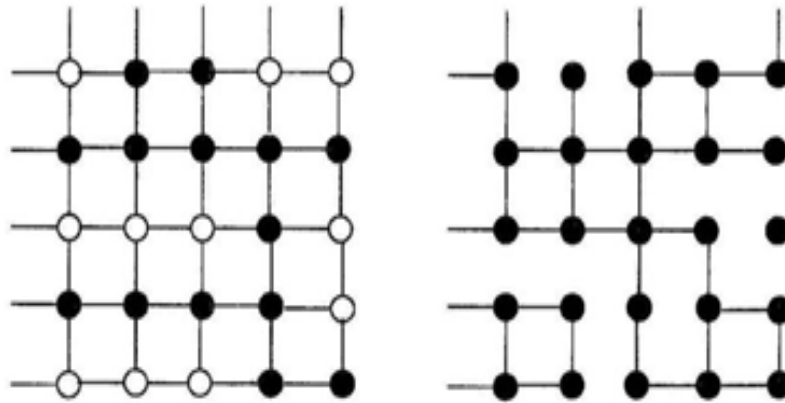


Рисунок 2.3 - Задача узлов (слева) и задача связей (справа) на квадратной

В задачах перколяции, в частности, исследуется, какую долю связей или узлов нужно удалить, чтобы сетка распалась. Перколяция может быть исследована на различных типах сеток, таких как треугольные, шестиугольные, трехмерные и случайные. Кроме того, изучаются характеристики соединяющего кластера: ниже порога перколяции кластеры остаются конечными.

Для порога перколяции вычисляют следующие характеристики [177]:

$\langle N_s \rangle$ – среднее число кластеров размера s ;

N – полное число ячеек;

$n_s(p) = \frac{\langle N_s \rangle}{N}$ – распределение кластеров по размерам;

$\sum_s sn_s(p)$ – полное число занятых ячеек;

$sn_s(p)$ - количество занятых ячеек, принадлежащих кластерам размера s ;

$\omega_s = \frac{sn_s(p)}{\sum_s sn_s(p)}$ – вероятность того, что случайно выбранный занятый узел в

кластеру размера s ;

$$S = \sum_s s \omega_s = \frac{\sum_s s^2 n_s(p)}{\sum_s s n_s(p)} - \text{средний размер кластера};$$

$P_\infty(p) = \frac{N_\infty}{N_{\text{занятых}}}$ – вероятность того, что случайным выбранный занятый узел принадлежит стягивающему кластеру;

$$\langle r \rangle = \frac{1}{s} \sum_{i=1}^s r_i - \text{радиус-вектор центра масс кластера};$$

$$R_s^2 = \frac{1}{s} \sum_{i=1}^s (r_i - \langle r \rangle)^2 - \text{радиус циркуляции};$$

$$\xi(p)^2 = \frac{2 \sum_s \langle R_s^2 \rangle s^2 n_s}{\sum_s s^2 n_s} - \text{длина корреляции};$$

Также исследуются следующие вопросы:

1. Структура субкритической и суперкритической фаз;
2. Что происходит вблизи порога перколяции;
3. Какова структура у перколяционного кластера;
4. Каковы значения и свойства различных макроскопических величин, таких как, например, средний размер кластера;
5. Что происходит, когда структура решетки и размерность пространства меняются и другие вопросы.

Перколяция делится на две фазы: при низкой концентрации существуют только конечные кластеры, при более высокой — образуются бесконечные кластеры. Концентрация занятых узлов аналогична температуре в фазовых переходах. Вероятность принадлежности узла бесконечному кластеру

соответствует параметру порядка, а характеристики кластера у порога перколяции описываются экспоненциальными функциями с критическими показателями:

$$\sum_s n_s(p) \propto |p - p_c|^{2-\alpha}$$

$$P_\infty(p) = \sum_s s n_s(p) \propto |p - p_c|^\beta$$

$$S(p) = \sum_s s^2 n_s(p) \propto |p - p_c|^\gamma$$

$$\sum_s s n_s(p) e^{-hs} \propto h^{\frac{1}{\delta}}$$

$$\xi(p) \propto (p_c - p)^{-\nu}$$

Критические показатели универсальны, зависят только от размерности пространства и связаны коэффициентами, независимо от типа решетки и перколяции (см. Таблица 2.1).

$$\alpha = 2 - d\nu = 2 - 2\beta - \gamma, \delta = \frac{\gamma}{\beta} + 1, \eta = 2 - \frac{\gamma}{\nu}, 2\beta + \gamma = \nu d,$$

где d — размерность пространства. Соотношение основано на масштабной инвариантности, при которой уравнения остаются неизменными при одновременном изменении всех расстояний.

Таблица 2.1. Размерность пространства

	Размерность пространства				
	$d = 2$	$d = 3$	$d = 4$	$d = 5$	$d \geq 6$
β	$\frac{5}{36}$	0.417 ± 0.003	0.5	0.7	1

ν	$\frac{4}{3}$	0.875 ± 0.008	0.7	0.6	$\frac{1}{2}$
γ	$\frac{43}{18}$	1.795 ± 0.005	1.8	1.6	1

В одномерной цепочке каждый узел занят с вероятностью p , и кластеры представляют собой группы соседних занятых узлов, ограниченные пустыми. Бесконечный кластер возможен только при $p = 1$, поэтому $p_c = 1$. Характеристики, такие как длина корреляции и среднее число узлов, можно вычислить только при $p < p_c$.



Рисунок 2.4 - Кластер на одномерной цепочке

Длина корреляции ξ и корреляционную функцию $g(r)$ описывают среднее число узлов в одном кластере на расстоянии r от выбранного узла. Чтобы узлы на расстоянии r принадлежат одному кластеру, все узлы $r - 1$ узлов между ними должны быть заняты с вероятностью p , то для $g(r)$ получается

$$g(r) = 2p^r \quad (2.20)$$

Коэффициент, равный 2, учитывает возможность нахождения узла как слева, так и справа от исходного. Длина корреляции это среднее расстояние между двумя узлами одного кластера. [153],

$$\xi^2 = \frac{\sum_{r=1}^{\infty} r^2 g(r)}{\sum_{r=1}^{\infty} g(r)} = \frac{\sum_{r=1}^{\infty} r^2 p^r}{\sum_{r=1}^{\infty} p^r}$$

$$\xi^2 = \frac{1+p}{(1-p)^2} = \frac{1+p}{(p_c-p)^2}$$

В одномерном случае $\nu = 1$. Используя этот результат, корреляционная функция $g(r)$ вблизи p_c выражается как:

$$\ln g(r) \propto -\frac{r}{\xi},$$

где корреляционная длина ξ — это расстояние, на котором корреляционная функция $g(r)$ уменьшается в e раз. Средняя масса кластера (среднее число узлов в кластере) S записывается как:

$$S = 1 - \sum_{r=1}^{\infty} g(r) \quad (2.21)$$

где 1 соответствует занятому исходному узлу. Из этого (2.21) следует:

$$S = \frac{1+p}{1-p} \propto \frac{1}{p_c-1} \quad (2.22)$$

что приводит к $\gamma = 1$ в одномерном случае.

Вероятность того, что узел принадлежит кластеру из s узлов, равна $sp^3(1-p)^2$. Множитель s указывает, что выбранный узел может быть любым из s узлов кластера, а $(1-p)^2$ — это вероятность наличия пустых узлов вокруг кластера (в одномерном случае их 2). Вероятность, пересчитанная на 1-й узел кластера, определяется как:

$$n_s = p^s(1-p)^2 \quad (2.23)$$

Это интерпретируется как количество кластеров размера s , деленное на общее число узлов в системе. По определению, $\sum_{i=1}^{\infty} sn_s = p$. Связь между средней массой кластера S и n_s , выражается как [153]:

$$S = \sum_{r=1}^{\infty} \left(\frac{sn_s}{\sum_{s=1}^{\infty} sn_s} \right) \quad (2.24)$$

где множитель в скобках представляет вероятность того, что занятый узел принадлежит кластеру из s узлов.

В дальнейшем при построении модели фазового перехода нас, в частности, будет интересовать дерево Кейли. Дерево Кейли – это структура без петель, которая строится следующим образом [178]. Начнем с центрального узла, от которого исходят z ветвей единичной длины. Конец каждой ветви также является узлом. Таким образом, мы получаем z узлов, которые образуют первую оболочку дерева Кейли. От каждого узла выходит $z-1$ новых ветвей, образуя $z(z-1)$ узлов второй оболочки. Это приводит к бесконечному дереву Кейли с z ветвями, исходящими из каждого узла. В случае $z=2$ дерево превращается в одномерную цепочку. На рис. 2.5 приведено дерево Кейли при $z=3$.

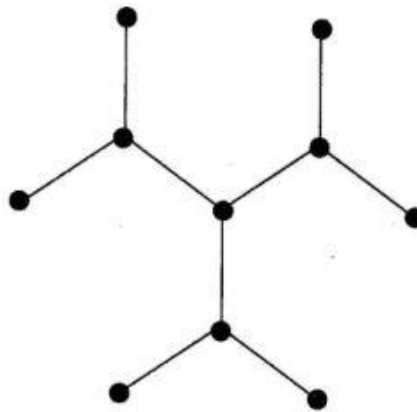


Рисунок 2.5 – Дерево Кейли при $z=3$. Показаны только первые два слоя

Можно рассмотреть дерево Кейли расстоянием l между узлами (например, длина химической связи).

В дереве Кэли, количество узлов на l -м уровне(или оболочке) составляет $z(z-1)^{l-1}$ узлов, что растет экспоненциально с увеличением l . В d -мерной евклидовой решетке, при конечном d , количество узлов на расстоянии l увеличивается как l^{d-1} . Поскольку дерево Кэли можно рассматривать как решетку бесконечной размерности, при $d \geq d_c$ его критические показатели аналогичны показателям любой бесконечной решетки.

Среднее число узлов кластера на расстоянии l от занятого узла определяет корреляционную функцию $g(l)$. Все узлы $l-1$ между двумя узлами находящимися на расстоянии l принадлежат одному кластеру и заняты. При случайной занятости узлов с вероятностью p , каждая оболочка дерева содержит $z(z-1)^{l-1}$ узлов, то

$$g(l) = z(z-1)^{l-1}p^l = \frac{z}{z-1}((z-1)p)^l \quad (2.25)$$

Критическая концентрация получается из (2.25). При $l_1 \rightarrow \infty$, $g(l)$ к нулю и расходится при $p(z-1) > 1$, что указывает на появление бесконечного кластера при $p \geq \frac{1}{(z-1)}$. Для дерева Кейли

$$p_c = \frac{1}{z-1} \quad (2.26)$$

Из (2.26) длину корреляции ξ_l можно вычислить по формуле:

$$\xi_l^2 = \frac{\sum_{l=1}^{\infty} l^2 g(l)}{\sum_{l=1}^{\infty} g(l)} \quad (2.27)$$

что касается линейной цепочки, то сумма может быть легко вычислена и дает

$$\xi_l^2 = p_c \frac{p_c + p}{(p_c - p)^2}, \text{ при } p < p_c. \quad (2.28)$$

В одномерном случае корреляционный показатель равен 1. Средняя масса конечного кластера S выражается как [178]:

$$S = 1 + \sum_{l=1}^{\infty} g(l) \quad (2.29)$$

Подставляя (2.26) в (2.29), дает:

$$S = p_c \frac{p_c + p}{p_c - p}, \text{ при } p < p_c. \quad (2.30)$$

Для кластера размером s существует только одна реализация, одна структура, однако вероятность появления кластера из s узлов с периметром t равна $p^s(1-p)^t$. При этом для одного и того же размера s возможны разные значения t . Например, на квадратной решетке кластер из 3 узлов может иметь периметр 7 или 8 в зависимости от их расположения. Обозначим $g_{s,t}$ как количество конфигураций кластера из s узлов, с периметром t . Например, на квадратной решетке, для кластера из 3 узлов $g_{3,7} = 4$ и $g_{3,8} = 2$. Общее выражение для n_s , имеет вид:

$$n_s = \sum_t g_{s,t} p^s (1-p)^t \quad (2.31)$$

На дереве Кейли, существует однозначная связь между размером кластера s и его периметром t . Кластер из 1 узла, окружен z узлами, а кластер из 2 узлов $z + (z - 2)$ пустыми узлами. В общем, кластер размера s имеет на $z - 2$ узлов периметра больше, чем кластер из $s - 1$ узла. Обозначим количество узлов периметра кластера из s узлов как $t(s)$, получим

$$t(s) = z + (s - 1)(z - 2) \quad (2.32)$$

При этом уравнение (2.31) превращается в

$$n_s(p) = g_s p^s (1-p)^{2+(z-2)s} = g_s (1-p)^2 (p(1-p)^{z-2})^s, \quad (2.33)$$

где g_s — число конфигураций кластера из s узлов.

Для нахождения n_s вблизи критической концентрации разложим $p(1-p)^{z-2}$ в ряд около точки $p_c = (z-1)^{-1}$:

$$n_s(p) \propto n_s(p_c) f_s(p), \quad (2.34)$$

где величина

$$f_s(p) = \left(1 - \frac{(p-p_c)^2}{2p_c^2(1-p_c)} \right)^s$$

экспоненциально уменьшается для больших s ,

$$f_s(p) = \exp(-cs) \quad \text{и} \quad c \propto (p-p_c)^2.$$

$f_s(p)$ является функцией только одной переменной $(p-p_c)s^\sigma$ с $\sigma = \frac{1}{2}$.

Для дерева Кейли можно точно определить g_s и, соответственно, $n_s(p_c)$, с помощью комбинаторных методов. Однако, предполагая, что $n_s(p_c)$ подчиняется степенному закону, можно использовать интегральный подход,

$$n_s(p_c) \propto s^{-\tau} \quad (2.35)$$

Показатель τ определяется из (2.21) (2.34)

$$S = \frac{1}{p} \sum_s s^2 n_s(p) \propto \sum_s s^{2-\tau} e^{-cs} \propto \int_1^\infty s^{2-\tau} e^{-cs} ds \quad (2.36)$$

После подстановки $z = cs$, получаем

$$S \propto c^{\tau-3} \int_c^\infty z^{2-\tau} e^{-z} dz. \quad (2.37)$$

При $\tau < 3$ когда $c \rightarrow 0$, интеграл сходится и тогда $S \propto |p-p_c|^{\frac{(\tau-3)}{\sigma}}$ или

$$\gamma = \frac{3-\tau}{\sigma} \quad (2.38)$$

Поскольку $\gamma = 1$ и $\sigma = \frac{1}{2}$, то $\tau = \frac{5}{2}$, что согласуется, с $\tau < 3$.

Каждый узел решетки может быть:

- пустым с вероятностью $1 - p$;
- заполненным и принадлежащим бесконечному кластеру с вероятностью $p(P_\infty)$,
- заполненным и не принадлежащим бесконечному кластеру с вероятностью $p(1 - P_\infty) = \sum_s sn_s$.

Точное соотношение для величины:

$$P_\infty = 1 - \frac{1}{p} \sum_s sn_s \quad (2.39)$$

Показателя β можно определить так: ниже порога перколяции $\sum_s sn_s = p$ и $P_\infty = 0$.

Если заменить сумму интегралом, он расходится при $c \rightarrow 0$ и выражение для P_∞ переписывается как:

$$P_\infty = 1 - \frac{1}{p} \sum_s s(n_s(p_c)n_s(p)) + \frac{(p - p_c)}{p} \quad (2.40)$$

Сумма пропорциональна величине:

$$c^{\tau-2} \int_c^\infty z^{1-\gamma} (1 - e^{-z}) dz$$

И поскольку для малых $z(1 - e^{-z}) \approx z$, интеграл не расходится и

$$P_\infty \propto c^{\tau-2} + const \times (p - p_c) \quad (2.41)$$

С помощью (2.41) это даёт β [68]

$$\beta = \frac{\tau-2}{\sigma} \quad (2.42)$$

Для дерева Кейли, $\beta = 1$ и в (2.40) имеют одинаковый порядок. Моменты P_∞ и S это первый и второй моменты распределения $n_s(p)$, а нулевой момент $M_0 = \sum_s n_s$ — это среднее число кластеров на узел.

$$M_0 = \sum_s n_s \propto |p - p_c|^{2-\alpha},$$

Это определяет α (критический показатель).

$$2 - \alpha = \frac{\tau - 1}{\sigma},$$

Из этого для дерева Кейли $\alpha = -1$. α и другие критические показатели $\beta, \gamma, \sigma, \tau$ не зависят от z , что подтверждает универсальность этих показателей.

Для дерева Кейли с заданной длиной l :

$$r^2 \propto l$$

Откуда следует $\tilde{\nu} = \frac{1}{d_{min}} = \frac{d_l}{d_f} = \frac{1}{2}$ и $\xi \propto \xi_l^{\frac{1}{2}}$. Так как $\xi_l \propto |p - p_c|^{-1}$, то $\nu = \frac{1}{2}$

в пространстве r для всех решеток при $d \leq 6$. Из $d_f = d - \frac{\beta}{\nu}$ и $\beta = 1$ получается, что $d_f = 4$, $d_l = 2$. При критической размерности 6 фрактальная размерность в бесконечномерном пространстве также равна 4.

Как отмечалось выше, критические показатели являются универсальными и определяются масштабной инвариантностью. Это позволяет применить для моделирования метод ренормализованных групп.

Рассмотрим такой подход для маленьких ячеек. Для маленьких кластеров или маленьких систем справедлив один из видов степенного закона, например $P \propto L^{-\frac{\beta}{\nu}}$, а для больших кластеров или систем выполняется иной степенной закон, например $P \propto |p - p_c|^\beta$. Другими словами, все кластеры или системы с линейным размером меньше, чем корреляционная длина ξ , подобны друг другу в среднем (постольку поскольку они содержат множество узлов).

Решетка имеет новую постоянную решетки b и ξ' измеряется в ее единицах: $\xi' = \frac{\xi}{b}$. Тогда уравнение [177]:

$$b|p' - p_c|^{-\nu} = |p - p_c|^{-\nu}$$

является основным уравнением в случае ренормализации в реальном пространстве. Логарифмирование приводит к выражению:

$$\frac{1}{v} = \frac{\log \frac{p' - p_c}{p - p_c}}{\log b} = \frac{\log \lambda}{\log b'}$$

где

$$\lambda = \frac{p' - p_c}{p - p_c} = \frac{dp'}{dp}$$

В частности, для одномерной цепочки $\lambda = bp^{b-1}$ (b – количество узлов в каждой ячейке) и $\lambda = b$ при $p = 1$. Соответственно, $v = \frac{\log b}{\log \lambda} = 1$.

Метод ренорм-групп позволяет решать задачи на более сложных решётках. Приведём пример для задачи узлов на треугольной решетке [68]. В этом случае каждый треугольник содержит три узла в вершинах и узел в центре треугольника. Центральный узел, обозначим его V , принадлежащий ренормализованному треугольнику, занят, если каждый из исходных узлов занят с вероятностью p . Если существует стягивающий кластер, узел V занят. Это возможно, когда все три узла заняты с вероятностью p^3 , или если заняты две соседние вершины, соединяющие противоположные стороны треугольника что происходит с вероятностью $p^2(1 - p)$. Следовательно, ренормализованная вероятность равна

$$p' = p^3 + 3p^2(1 - p) \quad (2.43)$$

Справа от критической точки имеет место полное сходство: $p' = p = p^*$. В нашем случае, уравнение $p' = pcp'$ из уравнения (2.43) получается три корня:

$$p^* = 0, \frac{1}{2}, 1$$

Решение $p^* = \frac{1}{2}$ — неподвижная точка, которая точно совпадает с известным критическим значением P_c для треугольной решетки. Разложим уравнение (2.43) в ряд вблизи критической точки:

$$p' = p^* + \lambda(p - p^*) + O(p - p^*)^2,$$

где

$$\lambda = \frac{dp'}{dp} = 6p - 6p^2 = \frac{3}{2} \text{ при } p = p^* = \frac{1}{2}.$$

В данном случае, мы имеем $b^2 = 3$ поскольку на плоскости три старых узла формируют один новый узел V . Тогда уравнение для параметра v получается:

$$v = \frac{\log \sqrt{3}}{\log \frac{3}{2}} = 1.355.$$

То есть достаточно близко к $\frac{4}{3}$.

При рассмотрении больших ячеек, чтобы обеспечить репрезентативную выборку можно использовать метод Монте-Карло. Идея метода заключается в том, чтобы сгенерировать случайным образом заполненные ячейки, а затем ренормализовать их. Также используется модель Поттса с Q состояниями при $Q \rightarrow 1$. Частичная функция модели Поттса (температурный фазовый переход)

$$Z_{Potts} = \left\langle Q^{\sum m_s} \right\rangle,$$

где каждый узел решетки может быть в одном из различных состояний. $n_s = \langle m_s \rangle$ — среднее число кластеров. Температура связана с вероятностью соотношением:

$$\log(1 - p) \propto T^{-1}$$

Аналог свободной энергии Гиббса

$$F_{Potts} = -kT(Q-1) \sum_s n_s,$$

Решение температурного фазового перехода в модели Поттса также дает решение для вероятностного фазового перехода в перколяции. С помощью этого метода разложение с помощью возмущений порядка ε и ε^2 с $\varepsilon = 6 - d > 0$ дает в случае d —мерного пространства. Следующие значения параметров:

$$\beta = 1 - \frac{\varepsilon}{7} - \frac{61}{12348} \varepsilon^2 + \dots \quad (2.44)$$

$$\gamma = 1 + \frac{\varepsilon}{7} + \frac{565}{12348} \varepsilon^2 + \dots \quad (2.45)$$

Определение порога перколяции, перколяционных кластеров и других характеристик могут быть получены с использованием алгоритмов. Соответствующей модифицированный алгоритм будет рассмотрен в четвёртой главе.

2.6 Выводы по главе 2

Во второй главе рассмотрены современные математические методы, которые могут быть применены для моделирования процессов переноса и фазовых переходов, а именно: динамические системы, гамильтоновы системы, виды энтропии, теория перколяции и р-адический анализ.

Важным аспектом главы является изучение хаотических и динамических систем. Рассмотрены основные свойства хаотических систем, такие как чувствительность к начальному состоянию и наличие аттракторов. Эти свойства важны для описания поведения частиц в дисперсных системах под воздействием

электромагнитного поля. Уделено внимание применению для анализа таких методов, как методы Пуанкаре и Якоби.

Другим важным аспектом данной главы является рассмотрение методов теории перколяции и p -адического анализа. Эти методы позволяют детализировать процессы переноса и фазовых переходов, изучать возникающие структуры, проводить анализ сложных систем.

Связь главы 2 с темой диссертации заключается в использовании представленных математических методов для построения и анализа моделей тепло- и массопереноса, а также фазовых переходов первого рода в условиях воздействия электромагнитного поля. Методы, описанные в главе, служат основой для численного моделирования, проведенного в последующих разделах работы.

Обзор главы 2 применяется в диссертации для обоснования выбора аналитических и численных методов, используемых в исследовании. Представленные результаты демонстрируют необходимость интеграции различных подходов для анализа поведения высокодисперсных систем в условиях внешнего воздействия.

Выводы главы подчёркивают значимость предложенных математических методов для изучения фазовых переходов и процессов переноса, а также их потенциал для решения задач, связанных с управлением свойствами дисперсных систем.

ГЛАВА 3. ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ПОЛЕЙ С НАНО- И МЕЗОСИСТЕМАМИ И ИНДУЦИРОВАННЫЕ ЭФФЕКТЫ

3.1 Некоторые решения нелинейных электродинамических уравнений

В настоящее время большой интерес представляют исследования в области фазовых переходов, барьерных эффектов и качественных преобразований гетерогенных систем (в том числе наносистем) различного типа (физических, технических, биофизических) в условиях внешних воздействий, прежде всего, электромагнитных полей, что связано, в частности, с возможностью управления. Рассеяние и поглощение монохроматической волны на сферической частице, как известно, может быть описано на основе классической теории Ми [178]. Позже теория была развита в применении к цилиндрам, несферическим частицам, коллективом частиц. В последнее десятилетие большой интерес вызывают исследования по распространению электромагнитных волн в нелинейных средах с учётом мнимых составляющих оптических характеристик. Такие процессы могут моделироваться с помощью комплексного уравнения Гинзбурга – Ландау. Исследования такого рода отчасти возникли благодаря успехам в области получения точных решений нелинейных гамильтоновых уравнений в виде солитонов и кноидальных волн [179, 181]. Получаемые решения имеют различные физические приложения, в частности, позволяют рассматривать эффекты, возникающие при взаимодействия электромагнитных волн с различными неоднородными системами, в том числе с суспензиями [182]. Также в настоящее время проводятся экспериментальные и теоритические исследования в области влияния радиационной составляющей на теплоперенос в неоднородных средах, содержащих включения различных размеров [183]. При рассмотрении процессов фазовых, барьерных эффектов, процессов типа «реакция – диффузия» необходимо

рассматривать гетерогенные системы, которые, в общем случае, обладают нелинейными свойствами [184-186].

В данной главе рассматриваются индуцированные эффекты процессы теплопереноса в гетерогенной системе, вызванный реакцией и протекающий в нелинейном электромагнитном поле, особенной теплопереноса и фазовых переходов в условиях электромагнитного резонанса.

Нелинейные уравнения Максвелла в случае зависимости диэлектрической проницаемости ε от электрического вектора имеют вид [187]:

$$\begin{aligned}\nabla \times \mathbf{E}_i &= -\frac{\partial \mathbf{B}_i}{\partial t} \\ \nabla \times \mathbf{H}_i &= \mathbf{J}_i + \frac{\partial \mathbf{D}_i}{\partial t} \\ \nabla \cdot \mathbf{D}_i &= \rho_i \\ \nabla \cdot \mathbf{B}_i &= 0\end{aligned}\quad (3.1)$$

где \mathbf{E} – вектор электрической напряжённости, \mathbf{B} – вектор магнитной индукции, $\mathbf{B} = \mu\mu_0\mathbf{H}$, μ – магнитная проницаемость вещества, \mathbf{H} – вектор магнитной напряжённости, \mathbf{j} – плотность тока, ρ – плотность зарядов, $\mathbf{D} = \varepsilon_0\varepsilon(\mathbf{E}) \cdot \mathbf{E}$ – вектор электрической индукции, t – время, i – среды.

Различные зависимости диэлектрической проницаемости вещества рассмотрение, например в [187]. Для получения уравнений в квазистационарном приближении можно выделить временную зависимость в виде экспоненты:

$$\begin{aligned}\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) &= \mathbf{E}_a(\mathbf{r})e^{-j\omega t} \\ \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) &= \mathbf{H}_a(\mathbf{r})e^{-j\omega t}\end{aligned}\quad (3.2)$$

где $j = \sqrt{-1}$, ω – круговая частота волны, $\mathbf{H}_a(\mathbf{r})$, $\mathbf{E}_a(\mathbf{r})$ – амплитуды электрического и магнитного векторов.

Здесь мы рассматриваем перенос электромагнитных волн в двухслойной оптически нелинейной сфере с целью дальнейшего определения поглощенной

электромагнитной энергии и, соответственно, источников тепла. Соответственно, в квазистационарном приближении система уравнений Максвелла для амплитуд электрического и магнитного векторов сводится к следующим уравнениям [188]:

$$\begin{aligned}\Delta \mathbf{E}_i + k^2 \varepsilon_i(E_{i1}, E_{i2}, E_{i3}) \mathbf{E}_i &= \nabla(\nabla \cdot \mathbf{E}_i), i=1,2 \\ \Delta \mathbf{H}_i + k^2 \varepsilon_i(E_{i1}, E_{i2}, E_{i3}) \mathbf{H}_i &= \nabla(k_{1i} \times \mathbf{E}_i) \\ \nabla \cdot (k_{1i} \mathbf{E}_i) &= 0, \nabla \cdot \mathbf{H}_i = 0\end{aligned}\quad (3.3)$$

где вводится обозначение: $k^2 = \frac{\omega^2}{c^2}$, $k_{1i} = \frac{j\omega}{c} \left(\varepsilon_i + j \frac{4\pi\sigma_i}{c} \right)$, E_{mi} , ($m = 1,2,3$) – компонент электрического вектора в ортогональной системе координат, $i = 1,2$, индекс «1» относится к внутреннему слою сферы, а индекс «2» - к внешнему слою. Комплексная диэлектрическая проницаемость ε_i обозначается как $\varepsilon_i = \varepsilon'_i(E_{i1}, E_{i2}, E_{i3}) + j \frac{4\pi\sigma_i}{c}$, c – скорость света, σ_i – проводимость. Уравнения (3.3) написаны для амплитуд векторов индекс “а” опущен, чтобы не загромождать запись. Для описания нелинейной зависимости диэлектрической проницаемости от электрического вектора часто используется закон Керра или его модификация [189]:

$$\varepsilon'_i = \varepsilon_{i0} - |\alpha_i| |\mathbf{E}_i|^2 \quad (3.4)$$

$$\varepsilon'_i = \varepsilon_{i0} - |\alpha_i| \mathbf{E}_i^2 \quad (3.5)$$

где α_i - параметр нелинейности для среды i . Ранее некоторые классы точных решений системы (3.3)-(3.4) и (3.3), (3.5) были найдены в предположении, что среды являются подобными друг другу телами с общим центром или осью симметрии (сферы, кубы, цилиндры, торы). Особенностью этих решений является постоянство модуля электрического вектора (для зависимости (3.4)) или квадрата электрического вектора (для зависимости (3.5)). Обозначим эти решения $\mathbf{E}_{iT}, \mathbf{E}_{iT}$. Они получены из условия $\varepsilon_i = 0$ и, таким образом, удовлетворяют системе (3.3) [190, 192]. Отметим, что в указанных работах получены точные решения и для

других зависимостей $\varepsilon(\mathbf{E})$, так что предложенный далее ход решения может быть обобщён. Также, как известно, уравнения Максвелла описывают поперечные электромагнитные волны. При необходимости можно учесть возникающие при взаимодействии с малыми частицами продольные волны следуя работе [193].

Приближенные решения вблизи этих точных решений можно найти из линеаризованных уравнений (3.3), представив векторы напряжений в виде: $\mathbf{E}_i = \mathbf{E}_{iT} + \mathbf{E}_i$, $\mathbf{H}_i = \mathbf{H}_{iT} + \mathbf{H}_i$. Тогда система (3.3) сводится к виду [193]:

$$\Delta \mathbf{E}'_i - 2k^2 \left(\varepsilon_{i0} + j \frac{4\pi\sigma_i}{c} \right) \mathbf{E}'_i = 0, \Delta \mathbf{H}'_i - 2k^2 \left(\varepsilon_{i0} + j \frac{4\pi\sigma_i}{c} \right) \mathbf{H}'_i = 0$$

$$\nabla \cdot \mathbf{H}'_i = 0, \nabla \cdot \mathbf{E}'_i = 0 \quad (3.6)$$

Граничные условия на границе внутренней сферы можно записать в виде:

$$E'_{1T} = E'_{2T}, E'_{1r} = E'_{2r}, H'_{1\phi} = H'_{2\phi}, \quad (3.7)$$

где индекс t означает "тангенциальная составляющая".

Из уравнений (3.6) следует, что они формально совпадают с линейными уравнениями Гельмгольца для определения векторов напряжений. Однако роль диэлектрической проницаемости играет величина $\hat{\varepsilon}_i = -2\varepsilon_{0i}$ и роль коэффициента связанными поглощением играет $\hat{k}_i = -\frac{8\pi\sigma_i}{\omega}$. Будем считать, что поглощения во внешней сфере нет, $\sigma_2 = 0$. Мы также предполагаем, что справедливо следующее неравенство: $R_2 \gg R_1$. В этом случае решение для рассеянной и поглощенной электромагнитной волны $\mathbf{E}'_1, \mathbf{H}'_1, \mathbf{E}'_1 \mathbf{H}'_1$ во внутренней частице совпадает с решением Ми в виде ряда с одним различием. Отличие связано с тем, что аргументом для радиальных функций является величина $(-j2\varepsilon_{20}kr)$, что приводит к необходимости использования функций Ганкеля второго рода (вместо функций Ганкеля первого рода), которые исчезают на бесконечности в комплексной плоскости с отрицательной мнимой частью.

3.2 Модель тепломассообмена

Исходя из результатов предыдущего раздела, можно определить количество поглощенной электромагнитной энергии во внутренней области системы и, следовательно, величину плотности теплового источника [188]:

$$q = m'_1 m''_1 I_0 k |\mathbf{E}_1|^2 / (\sqrt{\varepsilon_{20}} |\mathbf{E}_0|^2), \quad (3.8)$$

где I_0 - мощность лазерного излучения, m_1 - комплексный показатель преломления

$$m_1 = m'_1 + jm''_1, \quad m'_1 = \left(0.5 \left(\varepsilon_{10} + \left(\varepsilon_{10}^2 + \frac{16\pi^2 \sigma^2}{\omega^2} \right)^{0.5} \right) \right)^{0.5}, \quad m''_1 = \frac{2\pi\sigma}{\omega m'_1}, \quad \mathbf{E}_0 -$$

амплтуда электрического вектора падающей волны.

Конкретизируем выражение (3.8) для рассмотренных выше решений (для зависимости (3.5) как более общей). Формула получается с помощью условия (3.5), которое для точных решений можно записать так:

$$(\mathbf{E}'_{iT} + j\mathbf{E}''_{iT})^2 = \frac{(\varepsilon'_{i0} + j\varepsilon''_{i0})}{|\alpha_i|} \quad (3.9)$$

Поскольку \mathbf{E}_T является вектором, то в зависимости от вида системы и зависимости \mathbf{E}_T от координат, могут быть получены различные зависимости для компонент данного вектора. В данном случае рассматриваются сферы и в простейшем случае зависимости компонент $\mathbf{E}_{Tr}, \mathbf{E}_{T\theta}, \mathbf{E}_{T\varphi}$ только от радиальной координаты решения имеют вид [188]:

$$\mathbf{E}_{ir} = \mathbf{E}'_{ir} + j\mathbf{E}''_{ir} = \left(\frac{\varepsilon_{i0}}{2|\alpha_i|} + \frac{1}{2} \left(\left(\frac{\varepsilon_{i0}}{|\alpha_i|} \right)^2 + \frac{16\pi^2 \sigma_i^2}{\omega^2 |\alpha_i|^2} \right)^{0.5} \right)^{0.5} + j \left(-\frac{\varepsilon_{i0}}{2|\alpha_i|} + \frac{1}{2} \left(\left(\frac{\varepsilon_{i0}}{|\alpha_i|} \right)^2 + \frac{16\pi^2 \sigma_i^2}{\omega^2 |\alpha_i|^2} \right)^{0.5} \right)^{0.5} \quad (3.10)$$

$$\mathbf{E}_{i\theta} = \mathbf{E}_{i\varphi} = 0$$

В данном случае нас интересует внутренняя область, для которой $i = 1$. С учётом приближённых решений для \mathbf{E}' необходимо записать:

$$\mathbf{E}' = \mathbf{E}'_{1r} + \text{Re}(\mathbf{E}'_1) + j(\mathbf{E}'_{1r} + \text{Im}(\mathbf{E}'_1)) \quad (3.11)$$

С помощью выражений (3.8)-(3.10) можно получить следующую формулу для плотности теплового потока:

$$q = \frac{I_0 k m_1 m_1''}{\sqrt{\varepsilon'_{20}} |E_0|^2} \left(|E'_1|^2 + 2(\text{Re}(\mathbf{E}'_{1\rho})E'_{1r} + \text{Im}(\mathbf{E}'_{1\rho})E''_{1r}) + \left(\left(\frac{\varepsilon_{i0}}{|\alpha_i|} \right)^2 + \frac{16\pi^2 \sigma_i^2}{\omega^2 |\alpha_i|^2} \right)^{0.5} \right), \quad (3.12)$$

где $E'_{1\rho}$ - радиальная компонента вектора \mathbf{E}'_1 . Здесь мы предполагаем, что внутренняя область мала, например порядка нескольких нанометров. Поэтому можно усреднить плотность источника по его объему или, при необходимости, только по полярному и азимутальному углам. При усреднении по объему величина плотности источника становится постоянной, $q = \bar{q}$. Из выражений (3.10) и (3.11) можно видеть, что процедура усреднения путем интегрирования имеет смысл только для вектора \mathbf{E}'_1 .

Соответственно, уравнения для температуры в каждой из областей имеют следующий вид [188]:

$$C_p^{(i)} \rho^{(i)} \frac{\partial T^{(i)}}{\partial t} = \chi^{(i)} \left(\frac{\partial^2 T^{(i)}}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial T^{(i)}}{\partial r} \right) + q_i f_i(t) \quad (3.13)$$

Здесь $C_p^{(i)}$ - теплоемкость при постоянном давлении, $\rho^{(i)}$ - плотность вещества в i - среде, $q_2 = 0$, $q_1 = \bar{q}$, $\chi^{(i)}$ - коэффициент теплопроводности. Здесь вводится функция $f_i(t)$, поскольку действие источника в общем случае может быть прекращено или возобновлено во внутренней области:

$$f_i(t) = \begin{cases} 1, t \in [t_k, t_{k+1}], k = 0, 2, 4, \dots \\ 0, t \in [t_k, t_{k+1}], k = 1, 2, 3, \dots \end{cases}$$

Граничные условия на внутренней границе следующие [188]:

$$\begin{aligned}
T_{(1)} &= T_{(2)} \\
-\chi_{(1)} \frac{\partial T_{(1)}}{\partial r} &= \frac{\partial T_{(2)}}{\partial r} \\
\chi &= \frac{\chi_{(1)}}{\chi_{(2)}}, \quad x = \frac{r}{R_1}, \quad d = \frac{R_1}{R_2}, \quad b = \left(\frac{\chi c_p^{(1)} \rho^{(1)}}{c_p^{(2)} \rho^{(2)}} \right)^{\frac{1}{2}} \\
\tau &= \frac{t}{t_\chi}, \quad t_\chi = \frac{c_p^{(2)} \rho^{(2)} R_1^2}{\chi_{(2)}}
\end{aligned} \tag{3.14}$$

Решения краевой задачи (3.13) - (3.14) рассматривались, например, в работе [194] при моделировании переноса электронов на большие расстояния в белковой глобуле. В нашем случае на первом интервале воздействия постоянного электромагнитного источника решение для температуры имеет вид [188]:

$$\begin{aligned}
T_{(1)} &= T_{0(1)} + \frac{2\chi\bar{q}R_1 t_\chi}{c_p^{(1)} \rho^{(1)} r} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin(y_n b x) \varphi_n \psi_n(\tau)}{\sin(y_n b) y_n^2}, \\
T_{(2)} &= T_{0(2)} + \frac{2\chi\bar{q}R_1 t_\chi}{c_p^{(1)} \rho^{(1)} r} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin(y_n (d-x)) \varphi_n \psi_n(\tau)}{\sin(y_n (d-1)) y_n^2}, \\
1 - \chi + \chi b \operatorname{ctg}(by) + y \operatorname{ctg}(y(d-1)) &= 0, \\
\varphi_n &= (1 - by_n \operatorname{ctg}(by_n)) \left(1 - \chi + \frac{\chi b^2 y_n^2}{\sin^2(by_n)} + \frac{y_n^2 (d-1)}{\sin^2((d-1)y_n)} \right)^{-1}.
\end{aligned} \tag{3.15}$$

$\psi_n(\tau) = 1 - \exp(-y_n^2 \tau)$ в течение первого периода времени воздействия источника.

Определив температуру, можно рассмотреть перенос вещества (концентрацию) в каждой из областей и между ними. Предполагается, что изменение концентрации компонентов во внутренней области происходит за счет реакции, а во внешней области – за счет диффузии:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial c_1^{(1)}}{\partial t} &= -v(T_{(1)}) c_1^{(1)} c_2^{(1)}, \quad \frac{\partial c_2^{(1)}}{\partial t} = -v(T_{(1)}) c_1^{(1)} c_2^{(1)}, \quad \frac{\partial c_1^{(2)}}{\partial t} = D(T_{(2)}) \Delta c_1^{(2)}, \\
c_2^{(2)} &= 0, \quad c_1^{(1)}(0, r) = c_1^0, \quad c_1^{(2)}(0, r) = c_{10}, \quad c_2^{(1)}(0, r) = c_{20}
\end{aligned} \tag{3.16}$$

Здесь верхний показатель относится к среде, $D(T^{(2)})$ - коэффициент диффузии, оператор $\Delta \equiv \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r}$. Скорость реакции в общем случае зависит от температуры по закону Аррениуса:

$$v(T_1) = v_0 \exp\left(\frac{-U}{T_{(1)}R_g}\right), \quad (3.17)$$

где U - энергия, характеризующая реакцию, R_g - универсальная газовая постоянная.

В работе [188] приведены некоторые модификации данного закона, которые в конкретных случаях также могут быть использованы. Интегрируя первые два уравнения (3.16) вместе с выражением (3.17), можно исследовать два подхода: 1) рассмотреть температуру, зависящую от радиальной координаты и времени; 2) рассмотреть среднюю температуру по объёму $\bar{T}_{(1)}(t)$.

Средняя температура $\bar{T}_{(1)}(t)$ определяется по объёму $\frac{4\pi}{3}(R_1^3)$ и равна:

$$\bar{T}_{(1)} = T_{0(1)} + \frac{6\chi t \chi \bar{q}}{c_{\rho}^{(1)} \rho_{(1)}} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\psi_n(\tau) \varphi_n}{y_n^4 b^2} (1 - y_n b \operatorname{ctg}(y_n b)) \quad (3.18)$$

На границе R_1 граничные условия имеют вид:

$$c_1^{(1)} = c_1^{(2)}, \frac{\partial c_1^{(1)}}{\partial r} = \frac{\partial c_1^{(2)}}{\partial r}, c_2^{(1)} = 0. \quad (3.19)$$

Из системы (14) и условий (17) следует, что для определения концентрации первого компонента, проникшего во внешнюю область, в которой перенос происходит по диффузионному механизму, можно рассматривать (в зависимости от постановки задачи) как условия Дирихле, так и условия Неймана. Это возможно, потому что значение $c_1^{(1)}$ уже будет известно. При определении этой концентрации при скорости реакции, зависящей от средней температуры (3.18), необходимо использовать условия Дирихле из краевых условий (3.19), так как условия Неймана

становятся однородными (производная по координате равна нулю), и концентрация не проникает во внешнюю область.

Решение для $c_1^{(1)}$ имеет вид:

$$c_1^{(1)} = \frac{c_1^0(c_{20}-c_1^0) \exp(-v_0(c_{20}-c_1^0)J(t))}{c_{20}-c_1^0 \exp(-v_0(c_{20}-c_1^0)J(t))}, J(t) = \int_{t_j}^t \exp\left(-\frac{U}{\bar{T}_{(1)}(s)Rg}\right) ds \quad (3.20)$$

где t_j - начало соответствующего периода времени. Решение для $c_1^{(2)}$ получается из третьего уравнения системы (3.16), первого из условий (3.19) и выражения (3.20) путём решения задачи в частных производных с неоднородными краевыми условиями Дирихле $c_1^{(2)}(R_1) = c_1^{(1)}(R_1)$. На внешней границе можно поставить однородные условия Неймана: $\frac{\partial c_1^{(2)}}{\partial r} = 0$ или Дирихле: $c_1^{(2)}(R_2) = 0$. В этих случаях вводится величина $\xi(t) = \int D(\bar{T}_2) dt$ в качестве аналога времени. Запишем решение в случае смешанных условий как более реалистичных.

Обозначим через $t = \gamma(\xi)$ функцию для определения времени, то есть обратную к функции $\int D(\bar{T}_2(t)) dt$ при заданной зависимости коэффициента диффузии от температуры. Она может быть найдена с использованием выражения для температуры во внешней области. Решение указанной задачи имеет следующий вид:

$$c_1^{(2)} = \frac{c_1^{(1)}(\gamma(\xi))R_1(R_2-r)^2}{r(R_2-R_1)^2} + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{A_n}{r} \exp\left(-\frac{\mu_n^2 \xi}{R_2^2}\right) \left(\sin \frac{\mu_n r}{R_2}\right) - \operatorname{tg}\left(\frac{\mu_n}{d}\right) \cos\left(\frac{\mu_n r}{R_2}\right) \quad (3.21)$$

Здесь корни уравнения обозначены через μ_n :

$$\mu_n \operatorname{tg}(\mu_n(1-1/d)) = 1 \quad (3.22)$$

Так как рассматривается данный случай $d \gg 1$, решение (3.21)-(3.22) можно упростить и представить в следующей форме:

$$c_1^{(2)} = \frac{c_1^{(1)}(\gamma(\xi))R_1(R_2 - r)^2}{r(R_2 - R_1)^2} + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{R_2}{r} \exp(-\mu_n^2 \xi / R_2^2) (K_{1n} \sin(\frac{\pi nr}{R_2}) + K_{2n} \cos(\frac{\pi nr}{R_2})) \quad (3.23)$$

$$K_{10} = M_1 \int_{\kappa}^1 \frac{xdx}{\sin(\mu_0(1-\kappa)x)} - M_2 \int_{\kappa}^1 \frac{(1-x)^2 dx}{\sin(\mu_0(1-\kappa)x)}, K_{1n} = 2M_1 \int_{\kappa}^1 \frac{x \cos(\pi nx) dx}{\sin(\mu_0(1-\kappa)x)} - 2M_2 \int_{\kappa}^1 \frac{(1-x)^2 \cos(\pi nx) dx}{\sin(\mu_0(1-\kappa)x)},$$

$$K_{2n} = 2M_1 \int_{\kappa}^1 \frac{x \sin(\pi nx) dx}{\cos(\mu_0(1-\kappa)x)} - 2M_2 \int_{\kappa}^1 \frac{(1-x)^2 \sin(\pi nx) dx}{\cos(\mu_0(1-\kappa)x)}$$

$$M_1 = c_{10} \cos(\mu_0 \kappa) / (1 - \kappa), M_2 = c_1^{(0)} \kappa \cos(\mu_0 \kappa) / (1 - \kappa)^3, \kappa = 1/d.$$

Величина μ_0 определяется из уравнения $\mu_0 = \text{arctag}(1/\mu_0)$, $\mu_0 \approx 0,863$.

Интегралы вычисляются численно.

Для дальнейшего анализа приведём некоторые частные случаи формулы для концентрации (3.20) с учётом (3.17)-(3.18). В первом из таких случаев рассмотрим изотермический процесс, который поддерживается дополнительным подводом тепла или условиями теплоизоляции после того как произошел нагрев до некоторой температуры $\bar{T}_{k(1)} = T_{(1)}(t_k)$, например, за первый период времени $t = t_k$. В этом случае для концентрации в первой области можно записать:

$$c_1^{(1)} = \frac{c_1^0 (c_{20} - c_1^0) \exp\left(-v_0 (c_{20} - c_1^0) \exp\left(-\frac{U}{\bar{T}_{k(1)} R_g}\right) t\right)}{c_{20} - c_1^0 \exp\left(-v_0 (c_{20} - c_1^0) \exp\left(-\frac{U}{\bar{T}_{k(1)} R_g}\right) t\right)} \quad (3.24)$$

Во втором случае рассмотрим влияние изменяющейся во времени температуры на концентрацию при малых временах, когда можно ограничиться линейными членами в разложении экспоненты, входящей в функцию $\psi_n(t)$, в ряд, ограничиваясь несколькими первыми членами ряда N (при этом коэффициенты ряда для температуры (3.18) убывают примерно как $\frac{1}{y_n^2}$, например при $\chi \sim 1, b \sim 1$

величина $y_n = \frac{\pi n}{d}$). В этом случае выражение для интеграла $J(t)$ из (3.20) имеет вид:

$$J(t) \approx \frac{T_{0(1)} + \bar{q}Qt}{2.3\bar{q}Q} \exp\left(-\frac{U}{R_g(T_{0(1)} + \bar{q}Qt)}\right) - \frac{T_{0(1)}}{2.3\bar{q}Q} \exp\left(-\frac{U}{R_g T_{0(1)}}\right) + \frac{U}{R_g T_{0(1)}} \left(\ln\left(\frac{T_{0(1)}}{T_{0(1)} + \bar{q}Qt}\right) + \frac{T_{0(1)}}{T_{0(1)} + \bar{q}Qt} + \sum_{n=2}^{\infty} \frac{(-1)^n}{nn!} \left(\left(\frac{U}{R_g(T_{0(1)} + \bar{q}Qt)}\right)^n - \left(\frac{U}{R_g T_{0(1)}}\right)^n \right) \right) \quad (3.25)$$

где обозначено $Q = \frac{6\chi}{c_p^{(1)} \rho^{(1)}} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\varphi_n}{y_n^2 b^2} (1 - y_n b \operatorname{ctg}(y_n b))$. При получении (3.25) возникает интегральный логарифм, который был разложен в ряд согласно известной формуле:

$$li(x) = \gamma + \ln(\ln x) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(\ln x)^n}{nn!},$$

γ - постоянная Эйлера.

3.3 Анализ полученных результатов

Исследована модель двухкомпонентного массопереноса в неоднородной сферической системе, протекающего в нелинейном электромагнитном поле. Из полученных решений для источника тепла, температуры и концентрации (3.12), (3.18), (3.26), (3.23), (3.25) следует, что величина концентрации во внутренней области, на границе областей, а также концентрации, пересекшей границу и попавшей во вторую область, зависят от параметра нелинейности электродинамической задачи, от которого зависит плотность теплового источника.

Действительно, как видно из (3.10), (3.12), в выражение для теплового источника входит параметр нелинейности α . Соответственно, от него зависит температура в каждой из областей, поскольку она пропорциональна плотности теплового источника. Следовательно, через скорость реакции массоперенос зависит от характера зависимости диэлектрической проницаемости от поля. Такого рода влияние будет также иметь место и для модификаций закона Аррениуса [188].

В статье также в общем виде учитывается зависимость коэффициента диффузии от температуры. Соответственно, из формул (3.12), (3.15), (3.20), (3.21) следует, что на диффузионный механизм переноса концентрации также может влиять параметр электродинамической нелинейности. Реакция может протекать как со скоростью, практически независимой от температуры, так и в режиме активации, когда температура значительно влияет на скорость реакции. В данном случае в активационном режиме скорость реакции зависит от температуры внутренней области (как отмечено выше, данная температура напрямую зависит от плотности источника тепла) и радиуса R_1 . В рассматриваемой задаче возможны два механизма перехода от одного режима протекания в другой. Первый механизм обусловлен варьированием параметра нелинейности. Из (3.10), (3.12), (3.18), (3.20), (3.24), (3.25), что при относительно больших α скорость реакции и массоперенос заметно зависят от температуры, то есть реализуется активационный режим.

При малых α величины точных решений для электрического вектора E_T значительно возрастают (3.10). Тогда можно приближённо записать: $\bar{q} \approx \frac{S}{|\alpha|}$ и соответственно $\bar{T}_{(1)} \sim \frac{S}{|\alpha|}$. Здесь через S обозначена величина, приближённо полученная из (3.10), (3.12) при $\alpha \rightarrow 0$:

$$S \approx \frac{I_0 k m_1 m_1''}{\sqrt{\varepsilon_{20}} |E_0|^2} \left(\varepsilon_{10}^2 + \frac{16\pi^2 \sigma_i^2}{\omega^2} \right)^{0.5} \quad (3.26)$$

Отметим, что приведённый результат $\bar{q} \sim \frac{1}{|\alpha|}, \bar{T} \sim \frac{1}{|\alpha|}$ является достаточно общим и справедлив для точных решений рассматриваемого класса, опирающихся на выражение (3.9) и приведённых в [187]. Таким образом, происходит качественное изменение процесса переноса концентрации $c_1^{(1)}(t)$, обусловленное значительным возрастанием температуры в формуле (3.17). А именно: независимо

от параметров, входящих в формулу (3.19), и величины энергетического барьера U , экспоненциальная зависимость для концентрации в (3.20) и (3.24) принимает вид: $\exp(-v_0(c_2^0 - c_1^0)t)$. Таким образом, происходит переход в режим, когда скорость реакции практически не зависит от температуры (в пределе $\alpha \rightarrow 0$ данный результат получается точно). В этом режиме массоперенос происходит наиболее быстро. Полагая, что 99% от скорости реакции, не зависящей от температуры, можно считать скоростью в отсутствие барьера U , из закона Аррениуса можно получить, что температура при этом должна быть приближённо равна $T^* \approx 99,602U / R_g$.

Соответствующую плотность теплового источника можно оценить по формуле: $q^* \approx \frac{99,602U}{S_1 R_g} - \frac{-T_{0(1)}}{S_1}$, где $S_1 = \frac{6\chi t_\chi}{c_p^{(1)} \rho^{(1)}} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\psi_n(\tau_k) \varphi_n}{y_n^4 b^2} (1 - y_n b \text{ctg}(y_n b))$.

Важным также представляется рассмотрение перехода концентрации через границу раздела. Поскольку среда внешней области является непоглощающей, то скорость реакции, которая способствует распространению концентрации из области (1) в область (2), зависит от плотности теплового источника \bar{q} . Как показано выше, параметр нелинейности непосредственно влияет на эту величину и через температуру на скорость реакции (3.15), (3.20), (3.23). Большие значения параметра α приводят к увеличению энергетического барьера. Это, в свою очередь, приводит к тому, что основная часть концентрации $c_1^{(2)}$ некоторое время находится вблизи границы раздела (возникает барьерный эффект для распространения концентрации), а затем она постепенно диффундирует далее. Такой концентрационный барьер, в свою очередь, влияет и на электродинамические характеристики внешней области. При уменьшении α во внешней области (также, как и во внутренней) происходит переход от активационного к независящему от температуры режиму реакции.

Другим механизмом, переводящим активационный режим реакции в режим, который не зависит от температуры, является возникновение электромагнитного резонанса. Резонанс возникает при равенстве нулю знаменателей коэффициентов в решении E'_1 (решение представляет собой ряд, знаменатели членов которого зависят от R_1 и m_1). При этом также происходит качественное изменение зависимости $c_1^{(1)}(t)$ вследствие значительного возрастания температуры в выражении (3.20). Как и в первом рассмотренном механизме экспоненциальная зависимость для указанной концентрации принимает вид: $\exp(-\nu_0(c_2^0 - c_1^0)t)$. Из вышеизложенного следует, что параметр электродинамической нелинейности и размер внутренней области R_1 могут являться управляющими параметрами для массопереноса в рассматриваемой системе. В том числе, от их значений может зависеть режим, в котором происходит распространение концентрации.

Основные результаты параграфов 3.1 – 3.3 опубликованы в нашей статье [188]. Более подробно тепловые и другие эффекты в условиях электромагнитного резонанса рассмотрены в настоящей главе далее. Расчеты проводят по алгоритму который описан ниже и по программе который находится в приложении в пятой главе.

На рисунке 3.1 показана модель процесса переноса “реакция – диффузия” и расчёты проводились для модели, состоящая из внешнего слоя жидкого кристалла N- (4-метоксибензилиден)-4 бутиланилина (размер – 10 нм) и внутреннего слоя белка аланина (размер – 1 нм). Эта программа MATLAB моделирует тепловое воздействие лазерного излучения на два различных материала, аланин (разновидность белка) и MBVA (нематический жидкий кристалл / N- (4-метоксибензилиден)-4 бутиланилина), используя HeNe (гелий-неоновый) лазер с длиной волны 633 нм, мощность лазера 50 МВт (милливатт). Программа рассчитывает поглощение энергии и результирующее изменение температуры в каждом материале на основе нескольких факторов, таких как диэлектрические свойства, теплопроводность и размеры материала. Цель модели - имитировать

распределение тепла, вызванного лазером, в различных областях материалов, особенно в нелинейных системах, где тепло-и массопереноса не является линейной.

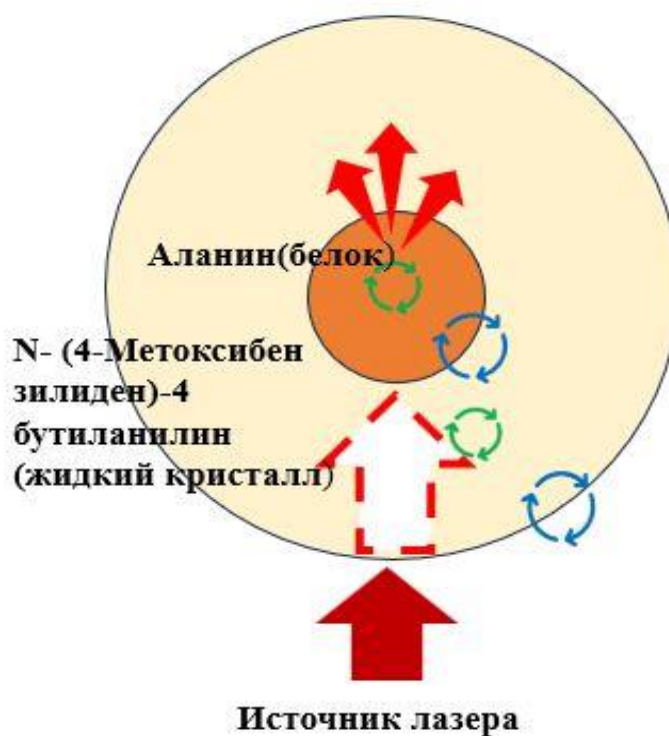


Рисунок 3.1- Модель процесса переноса “реакция – диффузия”

Программа использует нелинейное уравнение теплового потока для расчета теплового потока (q) для различных уровней нелинейности (α_1 , α_2 и α), где: α_1 представляет мелкомасштабную нелинейность (10%), α_2 представляет крупномасштабную нелинейность (90%). Программа строит график зависимости теплового потока от нелинейности как для аланина, так и для МВВА, показывая, как тепловые потоки протекают в каждом материале в зависимости от их специфического нелинейного поведения. Поглощаемая энергия зависит от нелинейной реакции материала на воздействие лазера, и это визуализируется на рисунках (3.2), (3.3) и (3.4).

Изменения температуры в двух областях с течением времени (τ) рассчитываются с использованием разложений в ряд Фурье и нелинейных формул теплопроводности. На температуру в каждой точке влияет несколько факторов, в том числе: теплоемкость (C_p^1 и C_p^2) материалов, теплопроводность (χ_1 и χ_2), Плотность (ρ_1, ρ_2) материалов, радиус зоны воздействия лазера в каждой области. Изменение температуры в каждой области отслеживается в течение различных временных интервалов (τ), варьирующихся от 0,01 до 1200 секунд. Это позволяет моделированию показать, как тепло накапливается и рассеивается с течением времени, создавая реалистичную модель воздействия лазера как на короткие, так и на длительные промежутки времени. Программа использует такие константы, как скорость света и молярная газовая постоянная (R_g), для обеспечения точных расчетов. Значения энергии активации (U_1 для аланина и U_2 для МВВА) используются для моделирования того, сколько энергии требуется для повышения температуры и структурных изменений в каждом материале. Затем полученные результаты используются для расчета \bar{T}^1 и \bar{T}^2 , средних температур каждого материала с течением времени.

Программа предоставляет подробные графики и результаты для определения температуры и распределения тепла в обоих материалах при лазерном облучении. Поглощенная энергия рассчитывается как для малых, так и для больших нелинейных областей, показывая, как каждый материал реагирует на лазерное воздействие. Рассчитывается и визуализируется повышение температуры с течением времени, что позволяет выявить различия в том, как аланин и МВВА поглощают и рассеивают лазерную энергию.

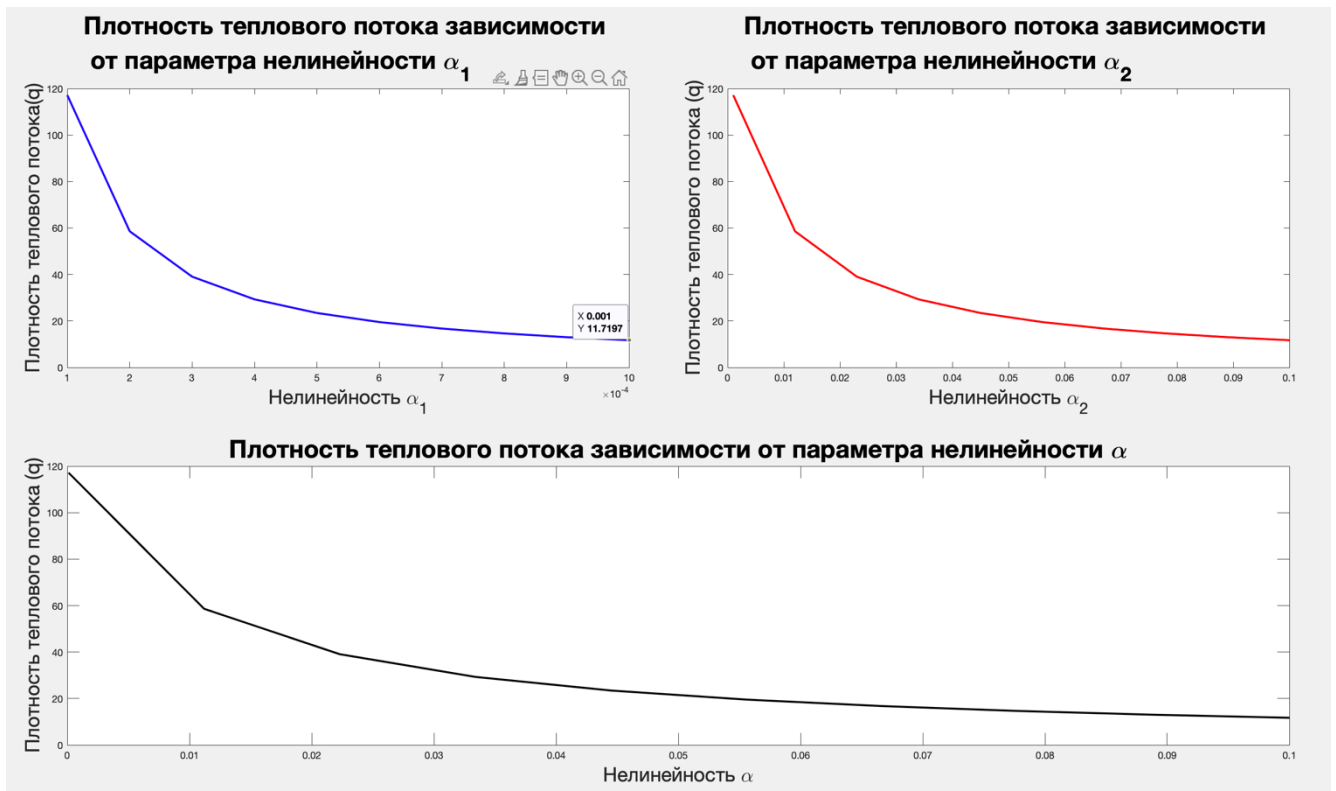


Рисунок 3.2 - Плотность теплового потока зависимости от параметра нелинейности α

На рисунке 3.2 показана взаимосвязь между плотностью теплового потока q и параметром нелинейности α . Верхний левый график, как изменяется плотность теплового потока в зависимости от параметра нелинейности α_1 . На графике видно быстрое снижение плотности теплового потока с увеличением α_1 , что указывает на нелинейную зависимость между этими переменными. На графике справа вверху так же показана как изменяется плотность теплового потока в зависимости от другого параметра нелинейности α_2 . С увеличением α_2 плотность теплового потока также уменьшается, что свидетельствует о согласованном поведении при различных параметрах. На нижнем графике показана общая зависимость плотности теплового потока от обобщенного параметра нелинейности α . Этот график продолжает демонстрировать уменьшение плотности теплового потока по мере увеличения параметра α .

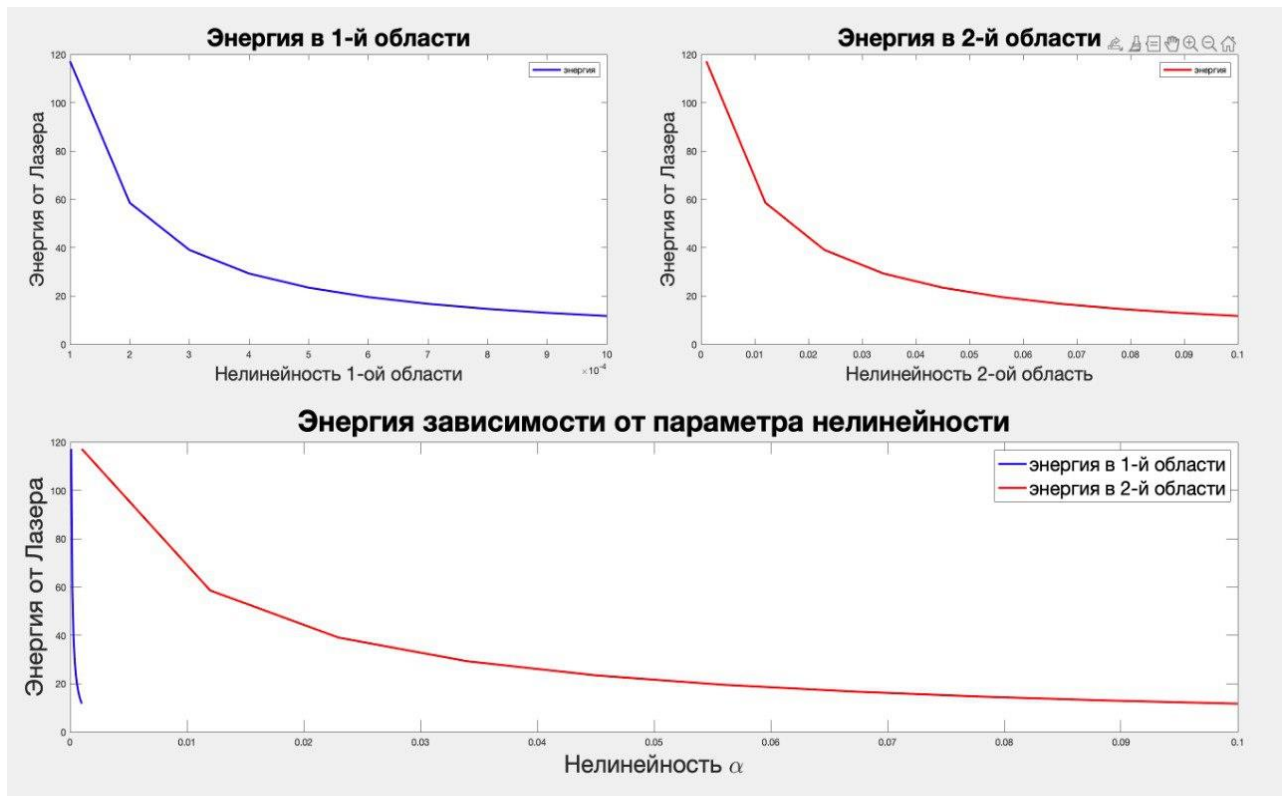


Рисунок 3.3 - Энергия зависимости от параметра нелинейности

На рисунке 3.3 показана взаимосвязь между поглощенной лазерной энергией и параметром нелинейности α . На каждом графике показано, как изменяется поглощение энергии в разных областях, демонстрируя влияние нелинейности на поглощение лазерной энергии. Верхний левый график показывает поглощенную энергию в первой области. Он показывает быстрое снижение поглощенной энергии по мере увеличения параметра нелинейности для этой области, что указывает на значительное нелинейное поведение. На верхнем правом графике показана аналогичная тенденция для второй области. По мере увеличения параметра нелинейности во второй области поглощенная энергия также уменьшается, как и в первой области. На нижнем графике объединены результаты для обеих областей, представляющие общую зависимость поглощенной лазерной энергии от обобщенного параметра нелинейности α . График продолжает показывать уменьшение поглощенной энергии по мере увеличения параметра нелинейности.

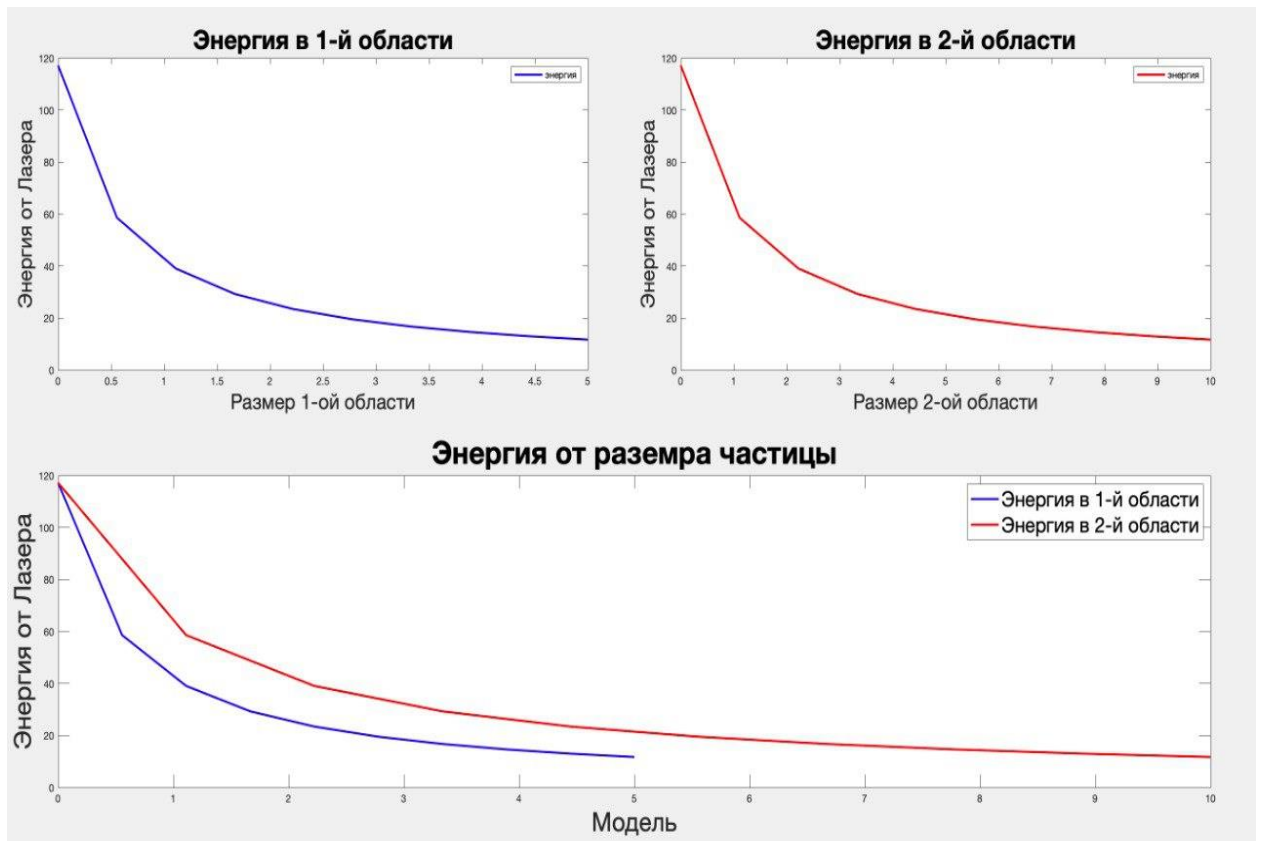


Рисунок 3.4 - Энергия от размера частицы

На рисунке 3.4 показана взаимосвязь между поглощенной лазерной энергией и размером частиц в различных областях. Верхний левый график показывает поглощенную энергию в первой области, которая уменьшается с увеличением размера частиц. На верхнем правом графике показано поглощение энергии также уменьшается по мере увеличения размера частиц. Нижний график обобщает эти результаты, сравнивая поглощенную энергию в обеих областях для разных моделей. Это указывает на значительное снижение поглощения энергии с увеличением размера частиц, что позволяет предположить, что более мелкие частицы, как правило, поглощают больше лазерной энергии по сравнению с более крупными.

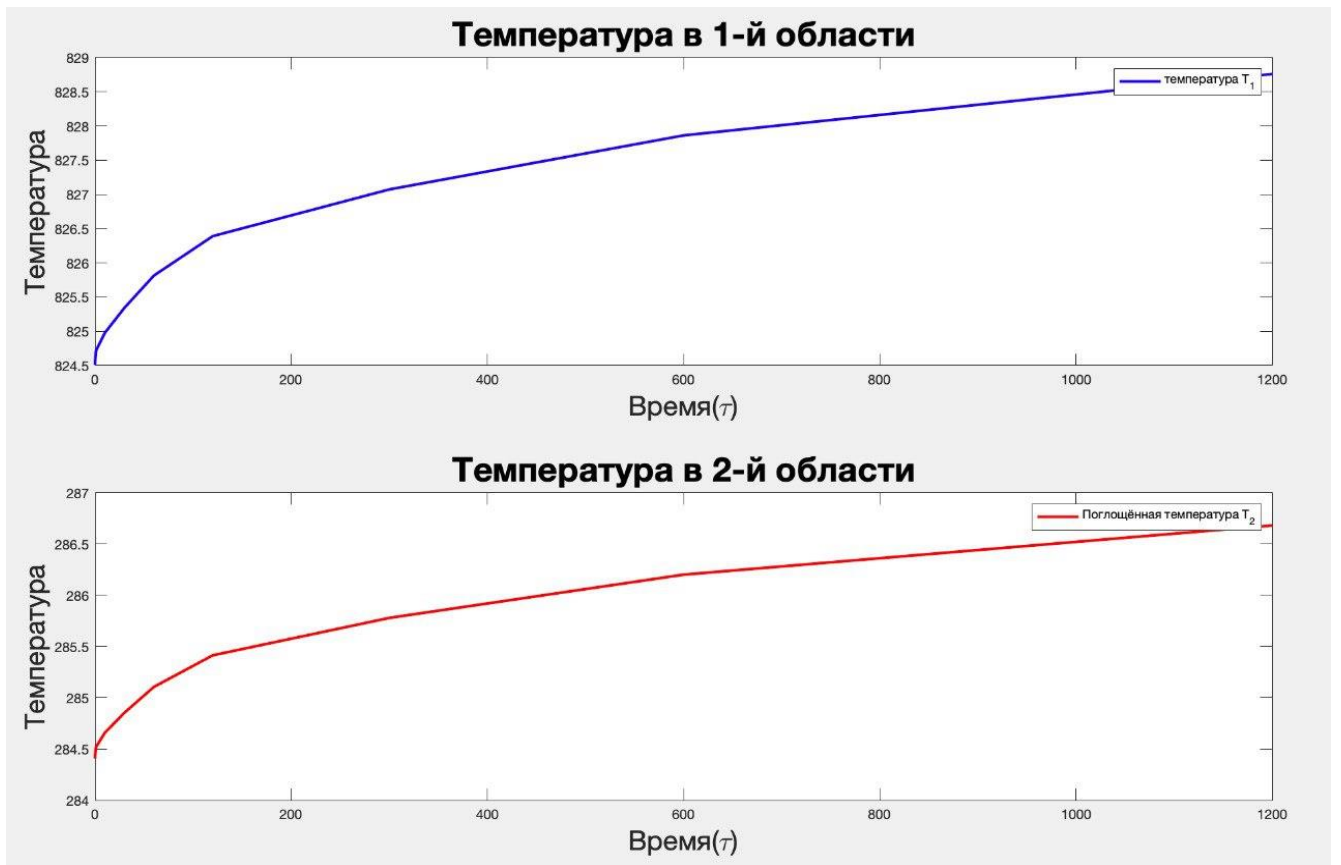


Рисунок 3.5 - Температура частицы вследствие энергии как функция времени

На рисунке 3.5 показана, как температура частиц меняется с течением различных временных интервалов (τ), варьирующихся от 0.01 до 1200 секунд. Верхний левый график показывает повышение температуры в первой области, демонстрируя устойчивый рост с течением времени. Верхний правый график демонстрирует аналогичную тенденцию для второй области, где температура также увеличивается с течением времени, хотя и с другой скоростью. На нижнем графике представлены изменения температуры в обеих областях в зависимости от времени. В течение времени поглощенная энергия приводит к постепенному повышению температуры, что подчеркивает зависящий от времени характер поглощения тепла в этих регионах.

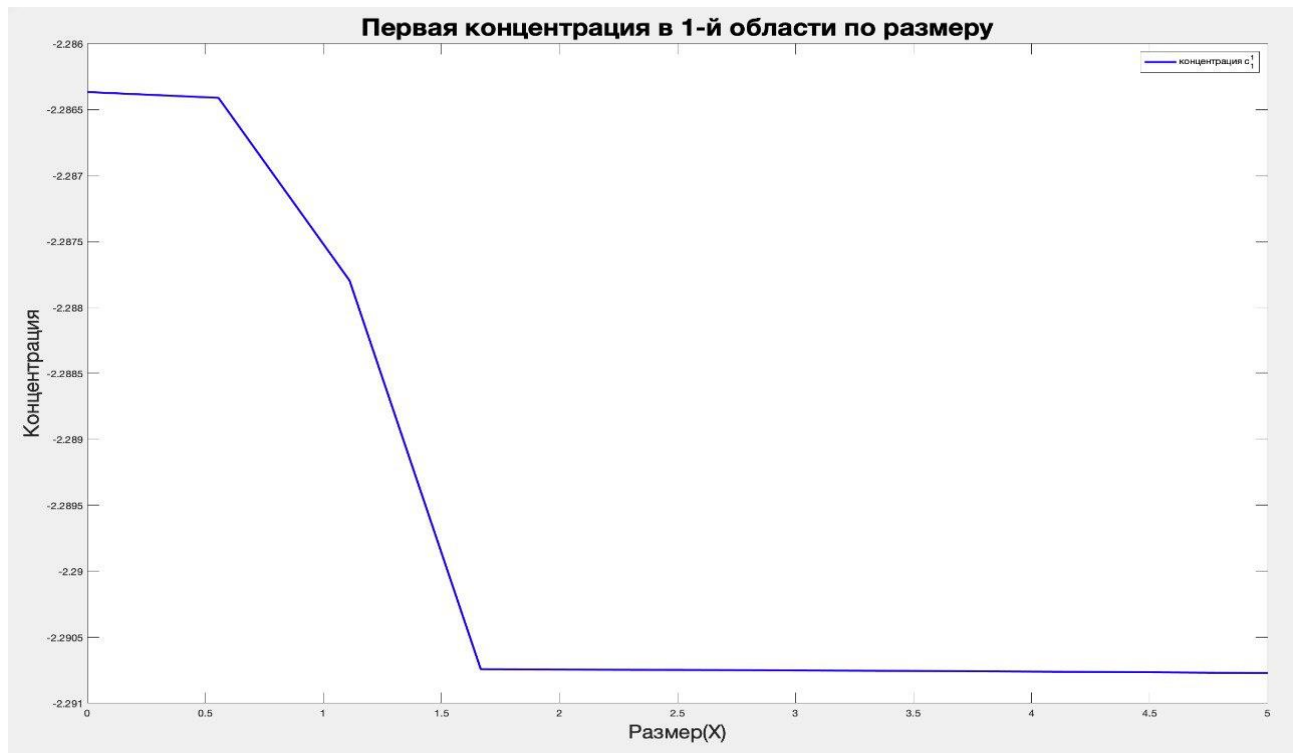


Рисунок 3.6 - Первая концентрация в 1-й области в зависимости от радиуса

На рисунке 3.6 представлены два графика, показывающие изменение первой концентрации в первой области. Верхний график показывает, как концентрация остается почти постоянной с течением времени, с небольшим изменением в начале перед стабилизацией. Нижний график иллюстрирует изменение концентрации в зависимости от размера, где вначале наблюдается заметное снижение, указывающее на то, что концентрация стабилизируется после определенного момента.

На рисунке 3.7 представлены два графика, показывающие изменение первой концентрации во второй области. На верхнем графике показано, как концентрация уменьшается с течением времени, начиная с резкого снижения и постепенно выравниваясь с течением времени. Нижний график иллюстрирует изменение концентрации в зависимости от размера, где наблюдается непрерывное снижение

по всему диапазону, что указывает на последовательное снижение концентрации по мере увеличения размера.

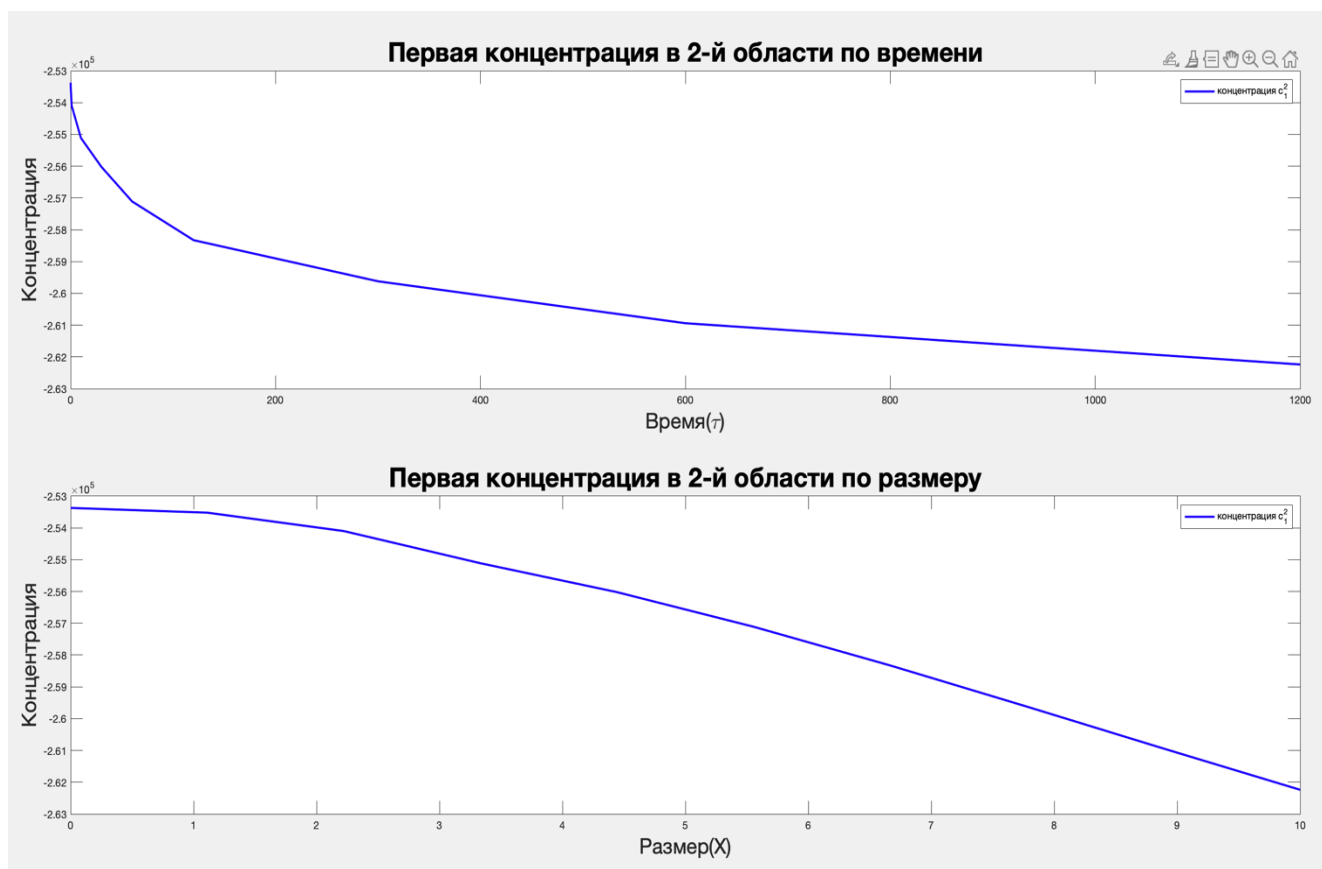


Рисунок 3.7 - Первая концентрация в 2-й области в зависимости от радиуса

На рисунке 3.8 показана взаимосвязь между концентрацией и температурой в разных областях модели. Верхний левый график показывает связь между первой концентрацией и температурой во внешней области, где концентрация резко снижается, а затем стабилизируется по мере повышения температуры. На верхнем правом графике показана концентрация постепенно снижается с повышением температуры, что указывает на более плавную тенденцию по сравнению с внешней областью. Нижний график показана связь концентрации и температур в модели. График выглядит почти ровным, влияние температуры на концентрацию в разных регионах может быть минимальным или усредненным.

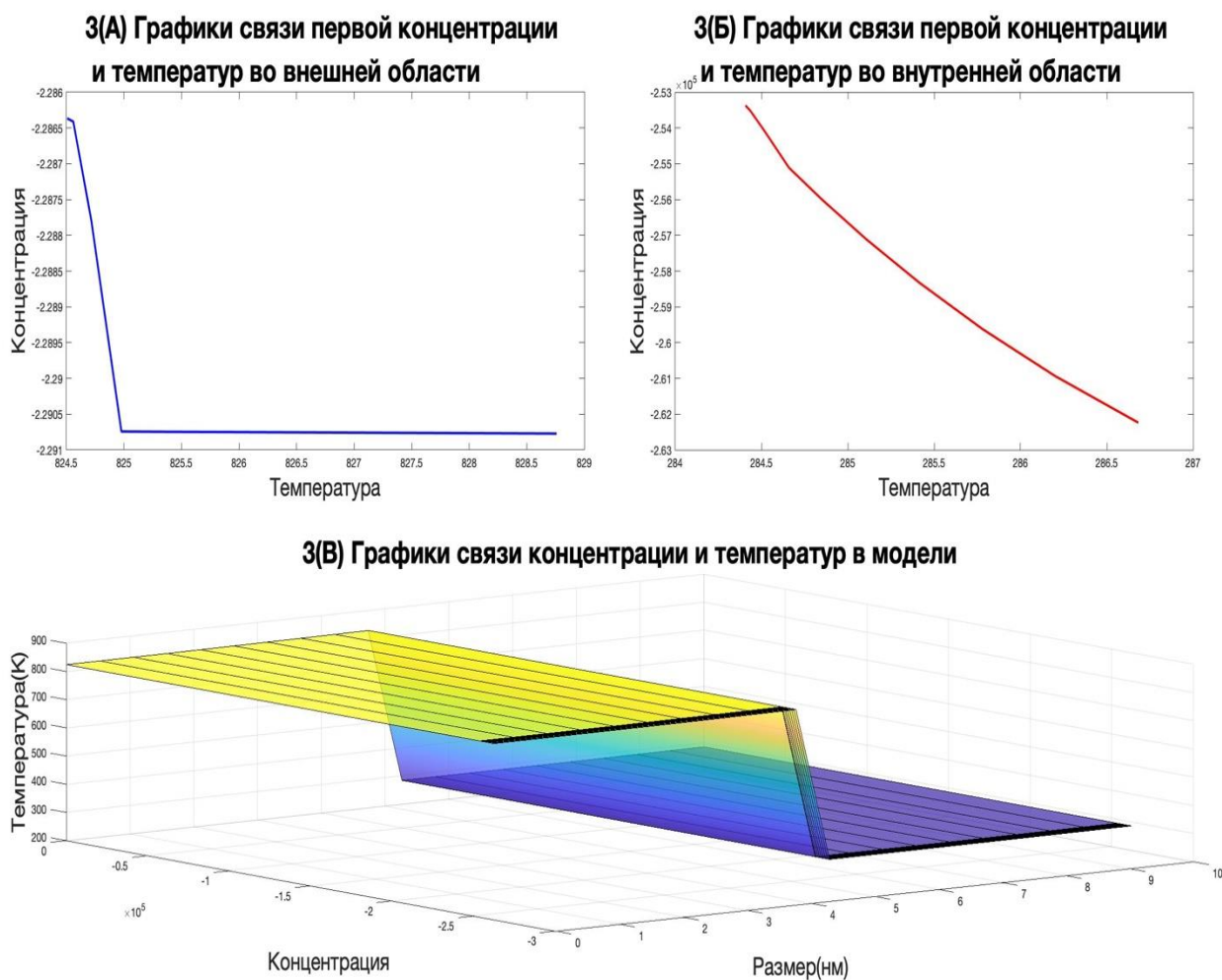


Рисунок 3.8 - Графики связи концентрации и температур в модели

Решение были получены аналитико-численно с помощью найденных здесь формул и численного определения интегралов K_{in} и корней трансцендентного уравнения (3.22). Описание алгоритма и его блок-схема приведена в пятой главе.

3.4 Математические модели электромагнитного резонанса

Рассмотрим воздействие электромагнитного резонанса как особый случай внешнего воздействия на мезо- и наноструктуры и особенности возникающих при этом индуцированных эффектов.

Электромагнитный резонанс в дисперсных средах имеет важное значение в различных приложениях (в частности, при измерении размеров частиц, возникновении индуцированных эффектов и др). Условия возникновения резонанса в одиночной сфере с постоянными оптическими характеристиками определяются из равенства нулю знаменателей ряда, представляющего собой решение для электрического вектора. Такие условия определяются из решения Ми для одиночной сферы при падении на неё монохроматической волны частоты ω и имеют вид [167].

$$\sqrt{\varepsilon_i} \xi_l^{(1)'}(k\sqrt{\varepsilon_2}R)\psi_l(k\sqrt{\varepsilon_1}R) - \sqrt{\varepsilon_j}\psi_l'(k\sqrt{\varepsilon_1}R)\xi_l^{(1)}(k\sqrt{\varepsilon_2}R) = 0 \quad (3.27)$$

Здесь введены следующие обозначения: R – радиус частицы, σ_1 – проводимость, ε_2 – диэлектрическая проницаемость окружающей среды, $\varepsilon''_2 = 0$, $i,j=1,2$, $\xi_l^{(1)}(x) = \sqrt{\frac{\pi x}{2}} H_{l+\frac{1}{2}}^{(1)}(x)$, $\psi_l(x) = \sqrt{\frac{\pi x}{2}} J_{l+\frac{1}{2}}(x)$, l – номер гармоники, $H_\nu^{(1)}(x)$ – функция Ханкеля первого рода, $J_\nu(x)$ – функция Бесселя первого рода, “штрих” обозначает производную по аргументу. Из (3.27) следует, что резонанс возникает при определённых значениях радиуса R и зависит от величины диэлектрической проницаемой её вещества. Отметим, что условия резонанса одинаковы для поглощённой и рассеянной волны.

В этом разделе мы рассматриваем взаимодействие электромагнитных волн с дисперсными частицами в следующих двух случаях:

- 1) в двухслойной поглощающей оптически нелинейной сфере;
- 2) в двух достаточно близко расположенных сферах (то есть, взаимодействующих сферических частицах).

Рассмотрим первый случай.

В этом случае используем зависимости диэлектрической проницаемости от поля (3.4)-(3.5) и уравнения (3.6)-(3.7). При рассмотрении падения

электромагнитной волны из второй области можно полагать, что поглощения во внешней сфере нет, $\sigma_2 = 0$. Отметим, что в теории электромагнитного резонанса, возникающего при взаимодействии плоскополяризованной волны со сферической частицей, фигурирует диэлектрическая проницаемость $\hat{\epsilon}_2 = -2\epsilon_{20}$. При одновременном выполнении условия $\sigma_1 = 0$ такая диэлектрическая проницаемость имеет место на частоте Фрелиха [188].

Будем также предполагать, что справедливо неравенство: $R_2 \gg R_1$. В этом случае решения линеаризованных уравнений (3.6) для рассеянной и поглощенной электромагнитной волны $\mathbf{E}'_1, \mathbf{H}'_1, \mathbf{E}''_1, \mathbf{H}''_1$ во внутренней частице в основном совпадают с решением Ми. Отличие заключается в следующем: используются функции Ханкеля второго рода (вместо функций Ханкеля первого рода), которые исчезают на бесконечности в комплексной плоскости с отрицательной мнимой частью.

Выпишем точные решения для компонентов электрического вектора для модифицированного закона Керра (3.5), полагая что они зависят от радиальной координаты r и полярного угла θ [197]:

$$\begin{aligned} E_{i\varphi} &= \sum_{\nu} F_i^{(\nu)}(r) P_{\nu}^{(1)}(\cos \theta), \\ E_{ir} &= f_i \cos \chi_i, \quad E_{i\theta} = f_i \sin \chi_i, \\ F_i^{(\nu)}(r) &= A_{i1}^{(\nu)} r^{\frac{m-1}{2}} + A_{i2}^{(\nu)} r^{-\frac{m+1}{2}}, \quad m = (1 + 4\nu(\nu + 1))^{1/2}, \\ A_{12}^{(\nu)} &= 0, \quad A_{11}^{(\nu)} = A_{21}^{(\nu)} + A_{22}^{(\nu)} R_1^{-m}, \\ f_i &= \left(\frac{\epsilon_{i0}}{|\alpha_i|} + j \frac{4\pi\sigma_i}{\omega|\alpha_i|} - E_{i\varphi}^2 \right)^{\frac{1}{2}} \end{aligned} \quad (3.28)$$

Здесь $P_{\nu}^{(1)}(\cos \theta)$ – присоединённые полиномы Лежандра $P_{\nu}^{(1)}(\cos \theta)$, $n = 1$. Через χ_i обозначены функции, определяемые из уравнений:

$$\chi_{1i} \phi_{1i}(r, \theta, \chi_i) + \chi_{2i} \phi_{2i}(r, \theta, \chi_i) = 0$$

χ_{1i}, χ_{2i} – постоянные, ϕ_{1i}, ϕ_{2i} – общие интегралы системы дифференциальных уравнений:

$$\frac{dr}{rf_i \cos \chi_i} = \frac{d\theta}{f_i \sin \chi_i} = \frac{d\chi_i}{U_{1i} \cos \chi_i - U_{2i} r \sin \chi_i - f_i \sin \chi_i} \quad (3.29)$$

$$U_{1i} = -\frac{E_{i\varphi}}{f_i} \sum_{\nu} F_i^{(\nu)}(r) P_{\nu}^{(1)}(\cos \theta) \left(P_{\nu}^{(1)}(\cos \theta) \right)_{\theta}'$$

$$U_{2i} = -\frac{E_{i\varphi}}{2f_i} \sum_{\nu} P_{\nu}^{(1)}(\cos \theta) \left((m-1)A_{i1}^{(\nu)} r^{\frac{m-3}{2}} - (m+1)A_{i2}^{(\nu)} r^{-\frac{5+m}{2}} \right)$$

На границе раздела выполняются условия:

$$E_{T1\theta} = E_{T2\theta}, E_{T1\varphi} = E_{T2\varphi} \quad (3.30)$$

Первое из условий (9) может быть переписано следующим образом:

$$f_1 \sin \chi_1 = f_2 \sin \chi_2 \quad (3.31)$$

Мы рассматриваем условие возникновения электромагнитного резонанса в оптически нелинейной сфере для приближённых решений $\mathbf{E}'_1, \mathbf{H}'_1$. В этом случае условие электромагнитного резонанса получается из решения системы уравнений (3.6) при $R_2 \gg R_1$ с использованием величин $\hat{\epsilon}_i$ и $\hat{\kappa}_i$. (решение может быть получено с помощью электрического и магнитного потенциалов Дебая [167]). Такое условие имеет вид:

$$\sqrt{\hat{\epsilon}_i} \xi_l^{(2)'}(k\sqrt{\hat{\epsilon}_2}R_1) \psi_l(k\sqrt{\hat{\epsilon}_1}R_1) - \sqrt{\hat{\epsilon}_j} \psi'_l(k\sqrt{\hat{\epsilon}_1}R_1) \xi_l^{(2)}(k\sqrt{\hat{\epsilon}_2}R_1) = 0 \quad (3.32)$$

где $\xi_l^{(2)}(x) = \sqrt{\frac{\pi x}{2}} H_{\frac{l+1}{2}}^{(2)}(x), H_{\nu}^{(2)}(x)$ – функции Ханкеля второго рода, $\hat{\epsilon}_1 = -2\epsilon_{10} - j \frac{8\pi\sigma_1}{\omega}$. При получении (3.32) учитывались также граничные условия (3.7). При этом поля во внешней области представляют собой сумму падающей и рассеянной волн. Например, при $l = 0$ условие (3.32) преобразуется к виду:

$$\operatorname{tg}(k\sqrt{\hat{\varepsilon}_1}R_1) = j\sqrt{\frac{\hat{\varepsilon}_2}{\hat{\varepsilon}_1}} \quad (3.33)$$

Здесь учтено, что $H_\nu^{(2)}(z) = \frac{J-\nu(z)-e^{\nu\pi j}J_\nu(z)}{-j\sin(\nu\pi)}$, $\nu = \frac{1}{2}$, $J_{\frac{1}{2}}(z) = \frac{2\sin z}{\sqrt{\pi z}}$, $J_{\frac{1}{2}}(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi z}}\cos z$.

Используя формулу Эйлера, из (3.33) можно получить: $J_{\frac{1}{2}}(z) = \frac{2\cos z}{\sqrt{\pi z}}$

$$\operatorname{tg}(2kR_1\gamma') \operatorname{th}(2kR_1\gamma'') = -\frac{4\delta}{2\delta' - \delta'^2 - \delta''^2} \quad (3.34)$$

Здесь введены обозначения:

$$\gamma' = (\sqrt{S} - 2\varepsilon_{10})^{\frac{1}{2}}, \gamma'' = (\sqrt{S} + 2\varepsilon_{10})^{\frac{1}{2}}, \delta' = \frac{(S - \varepsilon_{20}\varepsilon_{10})}{S}, \delta'' = \frac{4\pi\sigma_1}{\omega S},$$

$$S \equiv |\varepsilon_1|^2 = \varepsilon_{10}^2 + \frac{16\pi^2\sigma_1^2}{\omega^2}.$$

Из выражений (3.32)-(3.34) следует, что в оптически нелинейной дисперсной частице при определённых значениях диэлектрической проницаемости, радиуса частицы и частоты возникает электромагнитный резонанс. Условия возникновения резонанса в общем случае отличаются от условий для частицы с линейными свойствами (3.27). В частности, при $l = 0$ из (3.27) получается условие:

$$\operatorname{tg}(R_1\sqrt{\varepsilon_1}k) = -j\sqrt{\frac{\varepsilon_{20}}{\varepsilon_1}}, \quad (3.35)$$

которое отличается от (3.34). Отметим также, что в (3.32) роль коэффициента, связанного с поглощением, играет отрицательная величина $\hat{\kappa}_1 = \frac{-8\pi\sigma_1}{\omega}$. В настоящее время рассмотрение взаимодействия электромагнитных волн со средами с отрицательным коэффициентом поглощения является весьма актуальным [196]. В свою очередь, из данных условий можно определить резонансную частоту ω^* , задавая конкретные зависимости $\varepsilon_i(\omega)$ и фиксируя радиус R_1 .

Рассмотрим второй случай.

В дисперсной системе при расстояниях между частицами, сравнимыми с их размерами, имеет место взаимодействие между частицами при воздействии на них электромагнитного поля. Также взаимодействие влияет и на условие электромагнитного резонанса. Хорошо известно, что вероятность парного взаимодействия частиц наибольшая по сравнению с вероятностями взаимодействия трёх и более частиц. Рассмотрим модель взаимодействия монохроматического электромагнитного излучения с двум сферическими частицами. Две сферические частицы с радиусами R_1 и R_2 помещены в континуальную среду на расстоянии $O_1O_2 = R$. Ось z проходит вдоль линии, соединяющей центры частиц. Волновой вектор воздействующей плоской волны образует угол θ с положительным направлением оси z . Декартова систем координат $x'y'z'$ связана с центром O_1 первой частицы.

На рисунке 3.9, ось z' проходит вдоль вектора \mathbf{k} , ось x' проходит вдоль электрического вектора \mathbf{E} , ось y' проходит вдоль магнитного вектора \mathbf{H} , Декартовы системы координат x_1y_1z и x_2y_2z связаны с центрами сфер (пары осей x_1 и x_2 , y_1 и y_2 параллельны). Направления оси x_1 выбрано таким образом, чтобы вектор лежал в плоскости x_1O_1z , а ось y_1 располагалась вдоль так, чтобы система координат x_1y_1z была правой. Сферические системы координат $r_1\theta_1\varphi_1$, $r_2\theta_2\varphi_2$, $r'\theta'\varphi'$ связаны с той же декартовой системы координат. Прямая линия пересечения плоскостей x_1O_1z и $x'O_1y'$ обозначена через L' на рис.3.3. Электрический вектор образует угол β с плоскостью $\varphi = 0$ (β – угол между линиями L' и x').

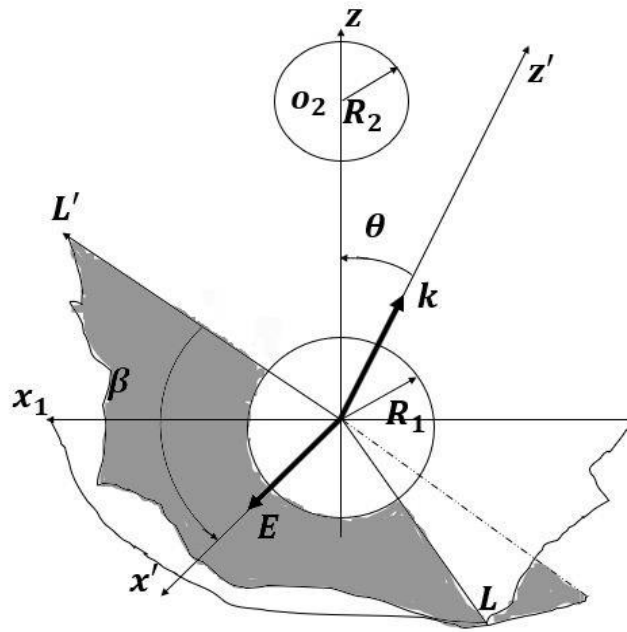


Рисунок 3.9 - Координатные системы для описания двух взаимодействующих частиц

Если диэлектрические проницаемости частиц являются постоянными величинами, то система (3.3) в данном случае приводится к следующему виду:

$$\Delta \mathbf{E}_i + k^{(i)2} \mathbf{E}_i = 0, \Delta \mathbf{H}_i + k^{(i)2} \mathbf{H}_i = 0 \quad (3.36)$$

где $k^{(i)}$ – волновое число для i – среды. $i = 0, 1, 2$, $k^{2(i)} = -k_1^{(i)} k_2^{(i)}$, $k_1^{(i)} = \frac{j\omega}{c} \left(\varepsilon_i + j \frac{4\pi\sigma_i}{\omega} \right)$, $k_2^{(i)} = j \frac{\omega}{c} = j k^{(0)}$.

Влияние соседней частицы может быть учтено следующим образом: внешнее по отношению к частице электромагнитное поле может быть представлено суммой двух составляющих: поля падающей плоской волны и поля, рассеянного от соседней частицы [198]. Электрический вектор и магнитный вектор можно выразить в терминах потенциалов Дебая, используя теорию Ми [167]. В сферических системах координат, связанных с центром каждой частицы,

дебаевские потенциалы падающего излучения будут представлены следующим образом:

$$U^f = \frac{1}{k^{(0)}} \sum_{l=1}^{\infty} i^{l-1} \frac{2l-1}{l(l-1)} \psi_l(k^{(0)} r_i) P_l^1(\cos \theta') \cos \varphi' \quad (3.37)$$

Потенциалы Дебая, соответствующие волне, рассеянной i – сферой:

$$U_i^s = \frac{1}{k^{(0)}} \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=-n}^n B_{nm}^{(i)} \xi_n^{(1)}(k^{(0)} r_i) P_n^m(\cos \theta_i) e^{jm\varphi} \quad (3.38)$$

И потенциалы Дебая в каждой сферической частице:

$$U_i^w = \frac{1}{k^{(i)}} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=-n}^n D_{nm}^{(i)} \psi_n(k^{(i)} r_i) P_n^m(\cos \theta_i) e^{jm\varphi} \quad (3.39)$$

Здесь надстрочные индексы f, s, w относятся соответственно к падающим, рассеянным и поглощённым волнам, B и D – коэффициенты, определяемые с помощью граничных условий. Аналогичные выражения могут быть записаны для магнитных потенциалов Дебая V . Совместное использование теории Ми и теории представления групп [199] позволяет определить потенциалы U и V и, следовательно, напряжённость электромагнитного поля в любой точке рассматриваемой системы [196]. Так, компоненты электрического вектора в общем случае через потенциалы Дебая в сферической системе координат выражаются следующим образом [167]:

$$\begin{aligned} E_r &= \frac{\partial^2(rU)}{\partial r^2} + k^2 r U \\ E_\theta &= \frac{1}{r} \frac{\partial^2(rU)}{\partial r \partial \theta} + \frac{k^2}{r \sin \theta} \frac{\partial(rV)}{\partial \varphi} \\ E_\varphi &= \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial^2 r U}{\partial r \partial \varphi} + \frac{k^2}{r} \frac{\partial(rV)}{\partial \theta} \end{aligned} \quad (3.40)$$

где в качестве k используется то или иное его значение в соответствующей среде.

Для определения условий возникновения электромагнитного резонанса важны именно коэффициенты разложения в ряды по полиномам Лежандра и цилиндрическим функциям. Резонанс возникает в случае реализации условий равенства нулю знаменателей указанных коэффициентов. В данном случае коэффициенты для волны рассеяния в окружающую среду и волны внутри каждой частицы определяются из бесконечной системы линейных алгебраических уравнений. Такая система может быть решена методом усечений. Например, коэффициенты рассеяния $B_{nm}^{(i)}$, найденные с использованием электрического потенциала Дебая, определяются из следующей системы [196,198].

$$B_{lm}^{(1)} = g_l^{(1)} \left(j^{l+1} \frac{2l+1}{l+(l+1)} L_{lm}^l \sum_{n=|m|}^{\infty} B_{nm}^{(2)} \Omega_{nlm}^{(1)} \right) \quad (3.41)$$

$$B_{lm}^{(2)} = g_l^{(2)} \left(j^{l+1} \frac{2l+1}{l+(l+1)} e^{jk^{(0)}R \cos \theta} L_{lm}^l \sum_{n=|m|}^{\infty} B_{nm}^{(1)} \Omega_{nlm}^{(2)} \right) \quad (3.42)$$

$$g_l^{(i)} = \frac{\tilde{n}^{(i)} \psi_l(P_i) \psi_l(\tilde{n}^{(i)} P_i) - \psi_l(P_i) \psi_l(\tilde{n}^{(i)} P_i)}{\tilde{n}^{(i)} \xi_l^{(1)}(P_i) \psi_l(\tilde{n}^{(i)} P_i) - \xi_l^{(1)}(P_i) \psi_l(\tilde{n}^{(i)} P_i)} \quad (3.43)$$

Здесь $P_i = k^{(0)} R_i$; $\tilde{n}^{(i)} = \frac{k^{(i)} k_2^{(0)}}{k^{(0)} k_2^{(i)}}$; угол θ – это угол между направлением волнового вектора проходящей электромагнитной волны и линией, соединяющей центры сфер; угол β – это угол между линией пересечения плоскостей $x'O_1y'$ и x_1O_1z и осью x' . Коэффициенты L_{lm}^m и $\Omega_{nlm}^{(i)}$ равны:

$$L_{1l}^m = \frac{1}{2} \frac{(m+l)!}{(m-l)!} j^{1-m} \left(l^{-j\beta} P_{l1}(\cos \theta) + j(-1)^l e^{j\beta} P_{l1}(-\cos \theta) \right),$$

$$P_{l1}(x) = \left(\frac{1+x}{1-x} \right)^{\frac{l+1}{2}} \sum_{v=\max(1,l)}^n \frac{(n+v)! (-1)^k}{(n-v)! (v-l)! (v-1)!} \left(\frac{1-x}{2} \right)^v,$$

$$\Omega_{nlm}^{(1)} = \frac{(n+m)!}{(n-m)!} (2l+1) \sum_{\sigma=|n-l|}^{n+l'} i^{-\sigma+l-n} h_{\sigma}^{(1)}(k^{(0)}R) \delta_{\sigma nl}^m,$$

$$\Omega_{nlm}^{(2)} = \frac{(n+m)!}{(n-m)!} (2l+1) \sum_{\sigma=|n-l|}^{n+l'} i^{-\sigma+l-n} h_{\sigma}^{(2)}(k^{(0)}R) \delta_{\sigma nl}^m,$$

где $h_{\sigma}^{(1)}(k^{(0)}R)$ – сферическая функция Ханкеля.

$$\delta_{lnv}^m = \int_{-1}^1 P_l^{-m}(x) P_n^{-m}(x) P_v(x) dx$$

Коэффициенты $\tilde{B}_{lm}^{(i)}$, найденные с использованием магнитного потенциала Дебая, получаются из $B_{lm}^{(i)}$ путём следующих замен:

B_{lm} на \tilde{B}_{lm} , L_{1l}^m на \tilde{L}_{1l}^m , $g_l^{(i)}$ на $\tilde{g}_l^{(i)}$. Величины \tilde{L}_{1l}^m и $\tilde{g}_l^{(i)}$ равны соответственно:

$$\tilde{L}_{1l}^m = \frac{1}{2} \frac{(m+1)!}{(m-1)!} f^{1-m} \left(l^{f\beta} P_{1,-l}^{f\beta}(\cos\theta) - l^{-f\beta} P_{-1,-l}^m(\cos\theta) \right),$$

$$\tilde{g}_l^{(i)} = \frac{\tilde{n}^{(i)} \Psi_l(P_i) \Psi'_l(\tilde{n}^{(i)} P_i) - \Psi'_l(P_i) \Psi_l(\tilde{n}^{(i)} P_i)}{\tilde{n}^{(i)} \xi_l^{(1)}(P_i) \Psi'_l(\tilde{n}^{(i)} P_i) - \xi_l^{(1)}(P_i) \Psi_l(\tilde{n}^{(i)} P_i)}$$

Для получения интеграла δ_{lnv}^m можно учесть, что $P_l^{-m}(x) = (-1)^m \frac{(l-m)!}{(l+m)!} P_l^m(x)$ и использовать формулу Гонта для интеграла от произведения трёх присоединённых полиномов Лежандра. Тогда получим:

$$\delta_{lnv}^m = 2 \frac{(l-m)!}{(l+m)!} (-1)^s \frac{v! (l+n-v)! s!}{(s-l)! (s-n)! (s-v)! (2s+1)!} \times \sum_{t=0}^u (-1)^t \frac{(l+m+t)! (v+n-m-t)!}{t! (l-m-t)! (n-v+m+t)! (v-t)!}$$

$u = \min(n, l - m)$, $s = \frac{l+n+v}{2}$. Из выражений (3.41)-(3.43) получаются условия возникновения электромагнитного резонанса. Из приравнивания нулю знаменателя в выражении (3.43) следует условие резонанса для каждой частицы, аналогичное (3.27):

$$\sqrt{\varepsilon_i} \xi_l^{(1)'}(k^{(0)} \sqrt{\varepsilon^{(0)}} R_i) \psi_l(k^{(0)} \sqrt{\varepsilon_i} R_i) - \sqrt{\varepsilon^{(0)}} \psi_l'(k^{(0)} \sqrt{\varepsilon_i} R_i) \xi_l^{(1)}(k^0 \sqrt{\varepsilon^{(0)}} R_i) = 0, \quad (3.44)$$

$i = 1, 2$.

Однако, как это видно из (3.41)-(3.42), коэффициенты $B_{lm}^{(1)}$ связаны с $B_{lm}^{(2)}$ и наоборот. Каждый из этих коэффициентов пропорционален $g_l^{(1)}$ и $g_l^{(2)}$ соответственно. Поэтому в данном случае, если резонанс возникает для одной из частиц (например, для частицы $i = 1$), то он приводит к сильному возрастанию какого-либо из коэффициентов $B_{lm}^{(1)}$, что, в свою очередь, приводит к сильному возрастанию коэффициента (коэффициентов) $B_{l^*m^*}^{(2)}$. Таким образом, резонанс возникает в двух взаимодействующих частицах. Из равенства нулю знаменателя $\tilde{g}_l^{(i)}$ также получается условие резонанса (при этом множители $\sqrt{\varepsilon_i}$ и $\sqrt{\varepsilon^{(0)}}$ перед первым и вторым членами (3.43) меняются местами). При его выполнении возрастание коэффициента $\tilde{B}_{lm}^{(1)}$ приводит к возрастанию коэффициента (коэффициентов) $\tilde{B}_{l^*m^*}^{(2)}$. Отметим, что условия резонанса, получаемые из коэффициентов рассеяния $B_{lm}^{(i)}$ или из коэффициентов поглощения $B_{lm}^{(w)i}$ одиноковы, так как они связаны между собой следующим образом:

$$B_{lm}^{(w)i} = B_{lm}^{(i)} d_l^{(i)}, \quad d_l^{(i)} = \frac{\tilde{n}^{(i)} (\xi_l^{(1)'}(P_i) \Psi_l'(P_i) - \xi_l^{(1)}(P_i) \Psi_l'(P_i))}{\Psi_l'(\tilde{n}^{(i)} P_i) \Psi_l(P_i) - \Psi_l(\tilde{n}^{(i)} P_i) \Psi_l'(P_i) \tilde{n}^{(i)}}$$

При рассмотрении оптически нелинейных частиц с нелинейностью Керра или её модификации может возникнуть ситуация, аналогичная рассмотренной выше в первом случае. Тогда для приближённых решений \mathbf{E}'_i и \mathbf{H}'_i , полученных

путём разложения вблизи точных решений \mathbf{E}'_{iT} , \mathbf{H}'_{iT} системы (3.6), для которых, как и ранее выполняется условия $\varepsilon_i(\mathbf{E}'_i) = 0$, будет иметь место система уравнений (5), которую необходимо решать для двух частиц. Для решения используется тот же подход, что и для решения системы (3.36), однако роль диэлектрической проницаемости играет величина $\hat{\varepsilon}_i = -2\varepsilon_{i0} - \frac{8\pi\sigma_i}{\omega}$, $i = 0,1,2$, $\sigma_0 = 0$. Предполагается также, как и ранее, что размер внешней области значительно превышает размеры внутренних областей, то есть $R_0 \gg R_1$ и $R_0 \gg R_2$.

Соответственно, условие возникновения резонанса запишется с помощью знаменателя $\hat{g}_l^{(i)}$, в который вместо функций $\xi_l^{(1)}$ входят $\xi_l^{(2)}$:

$$\sqrt{\hat{\varepsilon}_i} \xi_l^{(2)}(k^{(0)} \sqrt{\hat{\varepsilon}_0} R_i) \psi_l(k^{(0)} \sqrt{\hat{\varepsilon}_i} R_i) - \sqrt{\hat{\varepsilon}_i} \psi'_l(k^{(0)} \sqrt{\hat{\varepsilon}_i} R_i) \xi_l^{(2)}(k^{(0)} \sqrt{\hat{\varepsilon}_0} R_i) = 0 \quad (3.45)$$

При этом форма выражений для коэффициентов $B_{lm}^{(1)}$ и $B_{lm}^{(2)}$ (3.41)-(3.42) сохраняется с учётом следующих изменений: $g_l^{(i)}$ заменяется на $\hat{g}_l^{(i)}$ и в коэффициентах $\Omega_{nlm}^{(i)}$ вместо функции $\xi_l^{(1)}(k^i R_i)$ входит функция $\xi_l^{(2)}(\hat{k}^i R_i)$. Таким образом, в нелинейном случае (также как и линейном приближении) возникновение резонанса в одной частице влечёт за собой сильное возрастание коэффициентов разложения для электрического вектора в другой частице. Выражение для $\hat{g}_l^{(i)}$ имеет вид:

$$\hat{g}_l^{(i)} = \frac{\hat{n}^{(i)} \psi_l(P_i) \psi_l(\hat{n}^{(i)} P_i) - \psi_l(P_i) \psi_l(\hat{n}^{(i)} P_i)}{\hat{n}^{(i)} \xi_l^{(2)}(P_i) \psi_l(\hat{n}^{(i)} P_i) - \xi_l^{(2)}(P_i) \psi_l(\hat{n}^{(i)} P_i)} \quad (3.46)$$

где $\hat{n}^{(i)} = \frac{\hat{k}^{(i)} k_2^{(0)}}{\hat{k}^{(0)} k_2^{(i)}}$, $i = 1,2$, $\hat{k}^{(i)} = \frac{\omega}{c} \sqrt{\hat{\varepsilon}_i}$, $\hat{k}^{(0)} = \frac{\omega}{c} \sqrt{\hat{\varepsilon}_0}$.

Аналогичная модификация в нелинейном случае имеет место для $\tilde{g}_l^{(i)}$ и для условия возникновения резонанса соответственно.

3.5 Моделирование индуцированных эффектов

Как отмечалось выше, взаимодействие электромагнитных волн с неоднородными средами приводит к различным процессам и эффектам. Прежде всего, это тепло- и массоперенос, а также фазовые переходы.

Плотности тепловых источников, обусловленных электрическим вектором, могут быть записаны следующим образом (более удобным в данном случае, чем (3.8)):

$$q_i = \frac{2\omega n_{ir} n_{ia} |E|^2 I_0}{n_{mr} c} \quad (3.47)$$

Здесь n_{ir} – показатель преломления, n_{ia} – показатель поглощения, комплексный показатель преломления $n_i = n_{ir} + jn_{ia}$, $n_i = \sqrt{\varepsilon_i}$, $m = 2$ для двуслойной системы, $m = 0$ при рассмотрении континуальной среды, в которой находятся частицы, в общем случае, различных размеров. Для определения температуры необходимо решить уравнения теплопроводности:

$$\nabla(\chi_i \nabla T_i) = -q_i, \nabla(\chi_m \nabla T_m) = 0, \quad (3.48)$$

где $i = 1$, $m = 2$ в первом из указанных случаев и $i = 1, 2$, $m = 0$ во втором случае. Через χ_i, χ_m обозначены коэффициенты теплопроводности, зависящие в общем случае от температуры, $\chi_i = \chi_i(T_i)$, $\chi_m = \chi_m(T_m)$. Краевые условия имеют вид:

$$-\chi_i \frac{\partial T_i}{\partial r} = -\chi_m \frac{\partial T_m}{\partial r}, T_i = T_m - K_T L \frac{\partial T_m}{\partial r}, \quad (3.49)$$

где K_T – скачок температуры, L – средняя длина свободного пробега молекул окружающей среды. Величину $K_T L$ нужно учитывать, если континуальная среда является газом и число Кнудсена $K_n = \frac{L}{\min\{R_i\}}$ больше или сравнимо с единицей.

Более подробно мы остановимся на числе Кнудсена при описании модели фазового перехода в следующей главе.

В рассматриваемом здесь приближении: $\mathbf{E}_i = \mathbf{E}_{iT} + \mathbf{E}'_i$. Соответственно, $q_i \sim |\mathbf{E}_{iT} + \mathbf{E}'_i|^2$. При выполнении условия для резонанса среди членов ряда возникает сингулярная гармоника. Тогда за счёт неё (или вблизи выполнения этого условия) оказывается справедливым неравенство $|\mathbf{E}'_{il}| \gg |\mathbf{E}_{iT}|$ (поскольку возрастание точного решения лимитируется параметром нелинейности [176]) следовательно, $q_i \sim |\mathbf{E}'_{il}|^2$. Поэтому в данном случае плотность источника q_i^* приближённо равна:

$$q_i^* = w_i |\mathbf{E}'_{il}|^2, w = \frac{2\omega n_{ir} n_{ia} l_0}{n_{or} c} \quad (3.50)$$

Выше были рассмотрены точные решения, зависящие от аргументов r и θ . Рассматривая \mathbf{E}'_{ir} также в случае зависимости от этих аргументов для квадрата модуля электрического вектора можно записать:

$$|\mathbf{E}'_i|^2 = (\text{Re}(E'_{ir}))^2 + (\text{Im}(E'_{ir}))^2 + (\text{Re}(E'_{i\theta}))^2 + (\text{Im}(E'_{i\theta}))^2 \quad (3.51)$$

Здесь учтено, что в данном случае $E'_{i\varphi} = 0$. Величины E'_{ir} и $E'_{i\theta}$ равны соответственно (учтено, что в случае двухслойной системы $i = 1$):

$$\begin{aligned} E'_{ir} &= A_l \left(\psi''_l(\hat{k}^{(1)} r) + \frac{\hat{k}^2}{\hat{k}^{(1)2}} \psi_l \hat{k}^{(1)}(r) \right) P_l(\cos \theta) \\ E'_{i\theta} &= \frac{-1}{rk^{(1)}} A_l \psi'_l(\hat{k}^{(1)} r) P'_l(\cos \theta) \sin \theta \end{aligned} \quad (3.52)$$

Здесь резонансный коэффициент A_l равен:

$$A_l = \frac{\hat{k}^{(1)j^{l+1}} (2l+1) \xi_l^{(2)'}(\hat{k}^{(2)} R_1)}{\hat{k}_2^{(2)} \psi'_l(\hat{k}^{(1)} R_1) l(l+1)} \times \frac{\hat{k}_2^{(2)} \hat{k}^{(1)} \psi'_l(\hat{k}^{(2)} R_1) \psi_l(\hat{k}^{(1)} R_1) - \hat{k}_2^{(1)} k^{(2)} \psi'_l(\hat{k}^{(2)} R_1) \psi_l(\hat{k}^{(2)} R_1)}{\hat{k}_2^{(2)} \hat{k}^{(1)} \xi_l^{(2)}(\hat{k}^{(2)} R_1) \psi_l(\hat{k}^{(1)} R_1) - \hat{k}_2^{(1)} k^{(2)} \psi'_l(\hat{k}^{(1)} R_1) \xi_l^{(2)}(\hat{k}^{(2)} R_1)} \quad (3.53)$$

Производные берутся по соответствующим аргументам, $P'_l(\cos \theta) = \frac{l}{\sin^2 \theta} (P_{l-1}(\cos \theta) - \cos \theta P_l(\cos \theta))$.

Для решения уравнений (3.48) представим коэффициенты теплопроводности как функции температуры: $\chi_i = \chi_{i0}\tilde{\chi}_i(T)$, $\chi_m = \chi_{m0}\tilde{\chi}_m(T)$ и используем подстановку Кирхгофа, $\chi_0 = \chi$ при температуре T_{00} в отсутствие нагревания.

Тогда из (3.48) получим:

$$\Delta\tau_1 = \frac{-q_1(r,\theta)}{\chi_{10}}, \Delta\tau_2 = 0, \quad (3.54)$$

где $\tau_1 = \int_{T_0}^T \tilde{\chi}_1 dT_1$, $\tau_2 = \int_{T_0}^T \tilde{\chi}_2 dT_2$.

Из (3.54) с учётом (3.50)-(3.53) получаем следующие решения:

$$\tau_2 = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{C_n^{(2)}}{r^{n+1}} P_n(\cos\theta) \quad (3.55)$$

$$\begin{aligned} \tau_1 = \sum_{n=0}^{\infty} C_n^{(1)} r^n P_n(\cos\theta) - \frac{w}{2\chi_{10}} \left[\sum_{n=0}^{\infty} I_{n_1} \int_0^r \left| E_r^* \left(k^{(1)} S \right) \right|^2 \left(-\frac{s^{n+2}}{r^{n+1}} + \frac{r^n}{s^{n-1}} \right) ds + \sum_{n=0}^{\infty} (I_{n_2} - 2I_{n_3} + I_{n_4}) \times \right. \\ \left. \times \int_0^r \left| E_{\theta}^* \left(k^{(1)} S \right) \right|^2 \left(-\frac{s^{n+2}}{r^{n+2}} + \frac{r^n}{s^{n-1}} \right) ds \right] P_n(\cos\theta) \quad (3.56) \end{aligned}$$

При получении решения (3.56) были введены следующие обозначения: $E_r^*(r)$ и $E_{\theta}^*(r)$ – части гармоник E_r^* и E_{θ}^* , зависящие только от радиальной координаты, так что

$$\left| E_r^*(r) \right|^2 = \left(\operatorname{Re}(E_r^*(r)) \right)^2 + \left(\operatorname{Im}(E_r^*(r)) \right)^2,$$

$$\left| E_{\theta}^*(r) \right|^2 = \left(\operatorname{Re}(E_{\theta}^*(r)) \right)^2 + \left(\operatorname{Im}(E_{\theta}^*(r)) \right)^2.$$

Через $I_{n_1}, I_{n_2}, I_{n_3}, I_{n_4}$ обозначены следующие интегралы:

$$I_{n_1} = \int_{-1}^1 P_l^2(x) P_n(x) dx, I_{n_2} = \int_{-1}^1 P_{l-1}^2(x) P_n(x) dx,$$

$$I_{n_3} = \int_{-1}^1 P_{l-1}(x) P_l(x) P_n(x) dx, I_{n_4} = \int_{-1}^1 P_l^2(x) x^2 P_n(x) dx.$$

Данные интегралы могут быть вычислены непосредственно до наибольшего наибольшего номера члена ряда n_{max} , который будет приниматься во внимание при проведении расчётов методом усечения, например при нечётном числе I_{n_3} и I_{n_4} равны нулю. Также интегралы I_{n_1}, I_{n_2} могут быть найдены по формуле Гонта, а интегралы I_{n_3}, I_{n_4} – по обобщённой формуле Гонта от произведения полиномов Лежандра полученной в статье [198] с использованием гамма-функции. В данном случае нужно учесть, что $P_1(x) = x$.

Из первого из граничных условий (3.49) определяется следующее выражение, связывающее коэффициенты $C_n^{(2)}$ и $C_n^{(1)}$:

$$C_n^{(2)} = -\frac{\chi_{10}}{\chi_{20}} C_n^{(1)} R_1^{2n+1} \frac{n}{n+1} + \frac{w}{2} \frac{I_{n_1}}{\chi_{20}} \left(\int_0^{R_1} |E'_2(k^{(1)}s)|^2 \left(s^{n+2} + R_1^{2n+1} \frac{n}{(n+1)s^{n-1}} \right) ds \right) +$$

$$\frac{w}{2\chi_{20}} (I_{n_2} - 2I_{n_3} + I_{n_4}) \times \left(\int_0^{R_1} |E'_\theta(k^{(1)}s)|^2 \left(s^{n+2} + R_1^{2n+1} \frac{n}{(n+1)s^{n-1}} \right) ds \right)$$
(3.57)

Для определения $C_n^{(1)}$ необходимо использовать второе из условий (3.49). Для этого необходимо выразить T_i через τ , то есть получить обратную функцию $T_i = W(\tau_i)$. Тогда на границе R_1 при малых числах Кнудсена или малой величине скачка K_T будет выполняться условие $W_1(T_1) = W_2(T_2)$. Наиболее простой вариант получается при одинаковых функциональных зависимостях $\chi_i(T_i)$. В этом случае справедливо равенство $\tau_1(R_1) = \tau_2(R_1)$. Тогда, учитывая (3.57), для коэффициента $C_n^{(1)}$ получим:

$$C_n^{(1)} = \frac{1}{2} R_1^{-(2n+1)} \left(1 + \frac{\chi_{10} n}{\chi_{20}(n+1)}\right)^{-1} w \left[I_{n1} \int_0^{R_1} |E_r'^*(\hat{k}^{(1)} s)|^2 \times \left(s^{n+2} \left(\frac{1}{\chi_{20}} - \frac{1}{\chi_{10}} \right) + \frac{R_1^{2n+1}}{s^{n-1}} \left(\frac{n}{(n+1)\chi_{20}} + \frac{1}{\chi_{20}} \right) \right) ds + (I_{n2} - 2I_{n3} + I_{n4}) \int_0^{R_1} |E_\theta'^*(\hat{k}^{(1)} s)|^2 \left(\left(\frac{1}{\chi_{20}} - \frac{1}{\chi_{10}} \right) s^{n+2} + \frac{R_1^{2n+1}}{s^{n-1}} \left(\frac{1}{\chi_{10}} + \frac{n}{(n+1)\chi_{20}} \right) \right) ds \right] \quad (3.58)$$

поскольку коэффициенты известны, то известны τ_1 и τ_2 и соответственно T_1 и T_2 .

На основании формул (3.50)-(3.53), (3.56)-(3.58) можно провести анализ полученных результатов. Поскольку знаменатель коэффициента A_l при выполнении условия резонанса стремится к нулю, то поглощенная энергия значительно возрастает (формально стремится в бесконечность), тогда величина τ_1 также значительно возрастает. При этом, как это следует из формул (3.55), (3.57)-(3.58), величина τ_2 также стремится в бесконечность, хотя во второй области плотность теплового источника $q_2 = 0$. Это связано с передачей тепла из первой области во вторую. Поскольку $\tau = \int \tilde{\chi}(T) dT$, то величина температуры, определяемая как функция $w(\tau)$, зависит от вида зависимости коэффициента теплопроводности от температуры, которая к тому же может изменяться по-разному в разных температурных областях. Так, например, коэффициент теплопроводности при низких температурах может возрастать: $\chi \sim T^3$, а при высоких температурах уменьшаться: $\chi \sim \frac{1}{T}$, при этом $T^3 \sim \sqrt{\tau}$ и $T \sim e^\tau$. Это влияет на возрастание температуры, но она в любом случае значительно возрастает вблизи выполнения условия резонанса. Также достаточно часто зависимость $\chi(T)$ может быть аппроксимирована линейной функцией: $\chi(T) = a \pm bT$. В этом случае при уменьшении $\chi(T)$ с ростом температуры (знак «минус») имеется естественное ограничение $\chi_e = 0$, которое является стабилизатором для роста температуры: $T = \frac{a + \sqrt{a^2 - 2b\tau}}{b}$, $\tau \leq \frac{a^2}{2b}$.

Поэтому, если зависимости $\tilde{\chi}_1(T)$ и $\tilde{\chi}_2(T)$ различны, то может возникнуть ситуация, когда в одной из областей температура очень сильно возрастает, а в другой стабилизируется, несмотря на резонансные условия. Если стабилизация происходит во внешней области, то имеется некоторая аналогия с режимами обострения, которые возникают, в частности, при моделировании теплопереноса нелинейным параболическим уравнением. В этом случае при определённых зависимостях от температуры плотности теплового источника и коэффициента теплопроводности в локальной части пространства температура за конечное время стремится в бесконечность, а в остальной части пространства нагревания не происходит [180]. Возможна также ситуация, когда в зависимости от разных веществ во внутренней и внешней областях, температура возрастает во внешней области, а в области №1 она стабилизируется. Возникновение различных ситуаций даёт возможность управления в таких системах. Учёт числа Кнудсена приводит к некоторому уменьшению коэффициентов $C_n^{(i)}$. Так, например, при $\lambda_i = \text{const}_i$ множитель в (3.58) $\left(1 + \frac{\chi_{10}n}{\chi_{20}(n+1)}\right)^{-1}$ заменяется на множитель $\left(\frac{1}{1+K_T(n+1)\frac{L}{R_1}} + \frac{\chi_{10}n}{\chi_{20}(n+1)}\right)^{-1}$. Отметим, что при рассмотрении малых частиц можно усреднить плотность источника по объёму, что приводит к упрощению полученных формул. Такое приближение используется ниже при рассмотрении пары частиц. Теплоперенос вблизи выполнения условия резонанса влияет на другие эффекты. Так, при подвижности границы R_1 , например, при испарении в поле электромагнитного излучения, в процессе изменения R_1 может при некотором R_1^* осуществиться условие резонанса. Это приведёт к сильному разогреву частицы (с учётом зависимости $\chi_1(T_1)$, что обсуждалось выше) и почти моментальному её испарению или взрыву. Выше и в нашей статье [193] рассматривался массоперенос, обусловленный диффузией и реакцией, в двухкомпонентной среде в электромагнитном поле. Показано, что при сильном возрастании температуры

происходит переход от активационного режима протекания реакции, когда её скорость зависит от температуры, к режиму со скоростью реакции, практически независимой от температуры. Следовательно, при возникновении резонанса скорость реакции практически не зависит от температуры, что влияет на массоперенос, происходящий по типу, “реакция-диффузия” в целом. Отметим, что подобные эффекты могут возникнуть и при рассмотрении плотности источника вида $q_i \sim |\mathbf{E}_{iT} + \mathbf{E}'_{iU}|^2$, если l – гармоника близка к резонансной гармонике (но не равна ей).

Рассмотрим далее второй случай взаимодействия электромагнитного излучения с коллективом частиц. Выше были приведены коэффициенты решения для электрического вектора для системы из двух частиц. Частицы в системе в общем случае имеют различные радиусы и могут быть из различных веществ, то есть могут характеризоваться различными значениями диэлектрической проницаемости. Предполагается, что частицы в коллективе располагаются случайным образом. Моделирование теплопереноса описывается уравнениями (3.48) в бисферической системе координат:

$$\Delta \tau_i = \frac{(ch \zeta - \cos \eta)^2}{a^2 \sin \eta} \left[\frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{\sin \eta}{ch \zeta - \cos \eta} \frac{\partial \tau_i}{\partial \eta} \right) + \sin \eta \frac{\partial}{\partial \zeta} \left(\frac{1}{ch \zeta - \cos \eta} \frac{\partial \tau_i}{\partial \zeta} \right) + \frac{1}{\sin \eta (ch \zeta - \cos \eta)} \frac{\partial^2 \tau_i}{\partial \varphi^2} \right] = -\frac{q_i}{\chi_{i0}} \quad (3.59)$$

$$i = 0, 1, 2, q_0 = 0.$$

При этом граничные условия могут быть записаны так [181]:

$$\begin{aligned} -\chi_0 \frac{\partial T_0}{\partial \zeta} \Big|_{\zeta_i} &= -\chi_i \frac{\partial T_i}{\partial \zeta} \Big|_{\zeta=\zeta_i} \\ (T_\infty - T_1) \Big|_{\zeta=\zeta_1} &= -K_{T1} \frac{ch \zeta - \cos \eta}{a} \frac{\partial T_0}{\partial \zeta} \Big|_{\zeta=\zeta_1} \end{aligned} \quad (3.60)$$

$$(T_\infty - T_2)|_{\zeta=\zeta_2} = -K_{T2} \frac{ch \zeta - \cos \eta}{a} \frac{\partial T_0}{\partial \zeta} \Big|_{\zeta=\zeta_2}$$

$$T_0|_{\zeta \rightarrow 0} = T_\infty$$

Здесь a – полярное расстояние в бисферической системе координат, ζ, η – бисферические координаты. Поскольку в бисферической системе координат поверхность сферы является координатной поверхностью $\zeta = const$, то $\zeta_1 = const$, $\zeta_2 = const$ – соответственно уравнения поверхностей сферических частиц радиусов R_1 и R_2 .

Для малых частиц можно усреднить по их объёму V_i плотность тепловых источников:

$$\bar{q}_i = \frac{\int_{V_i} q_i dv}{\frac{4}{3}\pi R_i^3} \quad (3.61)$$

В этом случае решения для τ_i выражаются аналитически следующим образом:

$$1) \quad \tau_i = (ch \zeta - \cos \eta)^{1/2} \frac{\sqrt{2\bar{q}_i R_i^2}}{3\lambda_i^{(0)}} \sum_{n=0}^{\infty} \left[\exp\left((-1)^i \left(n + \frac{1}{2}\right) \zeta\right) \times \left(2 \operatorname{sh}^2\left(\left(n + \frac{1}{2}\right) \zeta_j\right) \operatorname{cth}(-1)^i \zeta_i + (-1)^i\right) \times \right. \\ \left. \times \operatorname{cth} \zeta \times \frac{\lambda_{i0}}{\lambda_\infty} \left(1 + \frac{\bar{q}_k}{q_i} \left(\frac{R_k}{R_i}\right)^2 \exp\left((-1)^k (2n+1) \zeta_k\right)\right) \right] P_k(\cos \eta) \quad (3.62)$$

$$2) \quad \tau_i = \sqrt{ch \zeta - \cos \eta} \frac{\bar{q}_k}{3\lambda_i^{(0)}} \sum_{n=0}^{\infty} \exp(2n+1) \left(\eta_k - \frac{\eta}{2}\right) P_k(\cos \eta), \quad (3.63)$$

$$\text{где } i \neq k, k = 1, 2; ch \zeta_k = \frac{(R^2 + R_i^2 - R_k^2)}{2dR_i}.$$

Данные выражения получены в предположениях: число Кнудсена мало, $K_n = \max\left(\frac{L}{R_1}\right) \ll 1$, параметры дифракции малы, $R_j \frac{\omega}{c} < 1$. Выражение (3.63) получено

также при условии, что одна из частиц является слабо поглощающей: $\sigma_1 \ll \sigma_2$ или $\sigma_2 \ll \sigma_1$. Здесь, как и ранее, предполагалось, что решение является однородным по углу φ , $\tau_i = \tau_i(\zeta, \eta)$. Также имеют место следующие равенства:

$$\begin{aligned} sh^2 \zeta_1 &= \frac{(d^2 + R_1^2 - R_2^2)^2}{4d^2 R_1^2} - 1; sh^2 |\zeta_2| = \frac{(d^2 + R_2^2 - R_1^2)^2}{4d^2 R_2^2} - 1, \\ cth \zeta_1 &= \frac{d^2 + R_1^2 - R_2^2}{\sqrt{(d^2 + R_1^2 - R_2^2)^2 - 4d^2 R_1^2}}, \\ cth |\zeta_2| &= \frac{d^2 + R_2^2 - R_1^2}{\sqrt{(d^2 + R_2^2 - R_1^2)^2 - 4d^2 R_2^2}}, \end{aligned} \quad (3.64)$$

где d – расстояние между центрами сфер.

Таким образом, при подстановке в (3.62)-(3.63) средних значений плотностей источников тепла, рассчитанных на основе решения электродинамической задачи для реальных дисперсных систем, мы получаем распределение температуры внутри частиц, обусловленное воздействием электромагнитного излучения. Для получения средних значений плотностей источников тепла, как это следует из формул (3.50), (3.61) необходимо проводить интегрирование по координатам базиса, связанного с той или иной частицей, квадрата модуля вектора электрической напряженности. Довольно громоздкие выражения для величин, его составляющих $|E|^2 = E_r^w E_r^{w*} + E_\theta^w E_\theta^{w*} + E_\varphi^w E_\varphi^{w*}$ (здесь * обозначены соответствующие комплексно-сопряжённые величины) приведены в [198]. Эти выражения упрощаются при рассмотрении зависимостей компонент электрического векторов от координат r_i , θ_i и выделении резонансной гармоники (или близкой к ней). Тогда для \bar{q}_i имеет место следующая формула:

$$\bar{q}_i = \frac{3}{2l+1} \frac{|B_{l0}^{(w)}|^2}{R_i^3} \int_0^{R_i} \left(|E_{lr}^{(w)i}(r_i)|^2 + |E_{l\theta}^{(w)i}(r_i)|^2 l(l+1) \right) r_i^2 dr_i,$$

где $E_{lr}^{(w)i}(r_i) = \Psi_l''(k^{(i)}r_i) + \Psi_l(k^{(i)}r)$, $E_{l\theta}^{(w)i}(r_i) = \Psi_l'(k^{(i)}r_i)r_i^{-1}$.

Если рассматриваются крупные частицы, то более корректным является решение уравнения (3.59) с источником без устреднения по объёму. При этом необходимо перейти от сферических координат (от которых зависит электрический вектор) к бисферическим координатам для определения температуры. Например, при $\beta = 0$, $\theta = 0$ (рис.3.3) для плотности теплового источника в частице №1 $q_1(r_1, \theta_1)$ нужно сделать переход:

$$r_1 = \left(\frac{\operatorname{ch} \zeta + \cos \eta}{\operatorname{ch} \zeta - \cos \eta} \right)^{\frac{1}{2}}, \quad \cos \theta_1 = \frac{a \sin \eta}{\sqrt{\operatorname{ch}^2 \zeta - \cos^2 \eta}}$$

и далее находить из неоднородного уравнения (3.59) решение для τ_1 .

Выполнение условия резонанса (3.44) для той или иной из частиц коллектива приводит тоже, как отмечалось выше, к увеличению некоторых коэффициентов для векторов напряжённости в соседних близко расположенных частицах. Взаимное влияние тепловых источников на температуру в соседних частицах непосредственно следует из формул (3.62)-(3.63). Из (3.63) следует тепловое влияние сильно поглощающей частицы на слабо поглощающую частицу, $\tau_i \sim \bar{q}_k$. Если знаменатель l – гармоники электрического вектора $\vec{E}_i(\omega)$ стремится к нулю, то тепловой источник q_i стремится к бесконечности и для соседних частиц $q_k \rightarrow \infty$. В этом случае имеет место механизм теплового разрушения частиц (конечно, при этом нужно учитывать вид зависимости коэффициентов теплопроводности от температуры, как это отмечалось выше). Данный механизм может привести к эффекту распространения резонанса по полидисперсной системе с широким спектром размеров частиц. Пусть условие резонанса имеет место для одной или нескольких частиц с радиусом R_i^* и с диэлектрической проницаемостью ε_i^* на частоте ω^* . Тогда несколько ближних частиц тоже сильно нагреваются. Соответственно изменяется и диэлектрическая проницаемость вещества частицы, поскольку она, в общем случае, зависит от температуры.

В линейном приближении зависимость комплексной диэлектрической проницаемости от температуры может быть представлено следующим образом:

$$\varepsilon_i = \varepsilon_{i0} + b_i(T_i - T_\infty), \quad (3.65)$$

где $\varepsilon_{i0} = \varepsilon_i(T_\infty)$, $b_i = \frac{\partial \varepsilon_i}{\partial T_i}$ при $T_i = T_\infty$. Соответственно T_i определяется из решения тепловой задачи. Поскольку рассматриваются малые по размеру частицы, то можно приближённо вместо τ_i рассмотреть среднюю по объёму $\bar{\tau}_i$ и соответственно среднюю температуру $\bar{T}_i = W(\bar{\tau}_i)$. Зависимость от температуры ε_i приводит (вследствие изменения температуры) к возникновению резонанса уже для других размеров R_i^{**} и так далее. Таким образом, возникновение резонанса может происходить в частицах различных размеров, то есть может происходить распространение резонанса по полидисперсной системе. В общем случае могут иметь место и другие зависимости диэлектрической проницаемости от температуры, например, $\varepsilon_i = \frac{B_i}{(T_{vi} - T_i)^{v_{i1}}}$, $\varepsilon_i = \varepsilon_{i0} e^{-\frac{U_i}{T_i} \left(\frac{T_i}{T_\infty}\right)^{v_{2i}}}$, где T_{vi} — температура Кюри-Вейса. Из (3.62)-(3.63) следует, что величина τ_i пропорциональна плотности теплового источника (для сильно поглощающей частицы $\tau_i \sim q_i$, для слабо поглощающей частицы $\tau_i \sim q_k$). Тогда условие выполнения резонанса зависит от плотности теплового источника и, следовательно, от мощности лазерного излучения I_0 . Эффект такого распространения резонанса может привести к частичной монодисперзации дисперсной системы (исчезновения частиц определённых радиусов из системы). При этом управляющими параметрами являются I_0 и ω . Данный эффект может иметь место и для оптически нелинейных частиц. При этом условие резонанса имеет вид (3.45), в котором диэлектрическая проницаемость зависит от \bar{T}_i . Отметим, что небольшое изменение диэлектрической проницаемости приводит к заметному изменению R_i^* . Так, для материала с $\varepsilon_{i0} = 3.1624$ величина $R_i k = 0.0109$, а при 3.17 величина $R_i k = 0.6915$ (такие значения диэлектрической проницаемости близки к её значениям для янтаря). Отметим

также, что такое распространение резонанса в случайной полидисперсной системе может являться примером детерминированного хаоса. Действительно, после небольшого числа переходов от одного резонансного радиуса к другому очень трудно определить исходную резонансную частицу. Это касается как оптически линейных дисперсных частиц, так и оптически нелинейных частиц.

Основные результаты параграфов 3.4 и 3.5 опубликованы в нашей статье [200].

Формула Гонта позволяет рассчитать поперечные сечения рассеяния при взаимодействии электромагнитных волн со сферическими частицами с учетом их размера, формы и свойств материала. Формула обычно выражается в терминах коэффициентов M_i , которые представляют собой комплексные числа, характеризующие рассеяние и поглощение электромагнитных волн частицей. Эти коэффициенты зависят от параметра размера x , который представляет собой отношение длины окружности частицы к длине волны падающего излучения, а также от комплексного показателя преломления материала частицы. Используя формулу Гонта и соответствующим образом решив задачу рассеяния, можно получить коэффициенты M_i , из которых можно определить модуль квадрата электрического вектора. Этот модуль отражает интенсивность рассеянного электромагнитного поля и предоставляет ценную информацию о взаимодействии между падающим излучением и частицей.

3.6 Численно-аналитический метод определения температуры дисперсной системы в электромагнитном поле

Полученные решения позволяют предложить численно-аналитический метод определения температуры дисперсной системы в электромагнитном поле с выделением резонансной гармоник. Метод включает следующие этапы:

1. Задание исходных параметров: радиус частицы R_1 , частота поля ω , интенсивность I_0 , начальная температура T_0 , теплопроводность k_T , диэлектрические проницаемости $\varepsilon_1(\omega)$ и $\varepsilon_2(\omega)$.
2. Расчет эффективных диэлектрических проницаемостей $\hat{\varepsilon}_i$ и решение уравнения резонанса для нахождения резонансных значений радиуса R_1^* и частоты ω^* .
3. Определение резонансного коэффициента A_l , компонентов электрического поля и теплового потока q_1 .
4. Определение температурного поля и итеративное уточнение параметров.
5. Для системы из двух частиц аналогично решается система уравнений резонанса, уточняются резонансные частоты и радиусы, учитывая взаимодействие частиц.
6. Определение температуры для двух частиц в электромагнитном поле, находящихся в континуальной среде.

Метод позволяет определять нагрев частиц под воздействием поля, учитывая резонансные эффекты и физические параметры как для одной, так и для нескольких частиц. Определение температуры позволяет, в свою очередь, найти концентрации в неоднородной системе, как это было показано выше для задачи «реакция – диффузия» с коэффициентом диффузии, зависящим, в общем случае, от температуры.

Опишем его более детально.

Здесь рассмотрим основные шаги предложенного нами **численно-аналитического метода определения температуры дисперсной системы в электромагнитном поле, особенностью которого является выделение резонансной гармоник.**

1. Одна частица

1.1 Задание данных $R_1, \omega, I_0, c, T_0, k_T$.

Задание зависимостей $\varepsilon_1(\omega), \varepsilon_2(\omega)$.

1.2 Определение $\hat{\varepsilon}_i, i = 1, 2$.

1.3 Задание конечного номера гармоники L^* .

1.4 Пошаговое решение уравнения – условия электромагнитного резонанса с шагом h_R или h_ω (3.32) и определение резонансных R_1^* и ω^* . Производные $\xi_l^{(2)}(x)$,

$\psi'_l(x)$ определяются численно, $x = R_1\sqrt{\hat{\varepsilon}_1}k, y = R_1\sqrt{\hat{\varepsilon}_2}k$.

1.5 Определение резонансного коэффициент A_l , (3.53).

1.6 Определение компонент электрического вектора E_r^*, E_θ^* и $|\mathbf{E}_i^*|^2$, (3.51)-(3.52).

1.7 Задать число Кнудсена K_n и скачок температуры K_T .

1.8 Задание коэффициентов $\lambda_{10}, \lambda_{20}$ и зависимостей $\tilde{\lambda}_1(T_1), \tilde{\lambda}_2(T_2)$.

1.9 Определение плотности теплового потока $q_1 = w|\mathbf{E}_{1l}|^2$, где $w = \frac{2\omega n_{r1} n_{1a} l_0}{n_{r0}}$

1.10 Определение интегралов $I_{n1}, I_{n2}, I_{n3}, I_{n3}$, например по формуле Гонга.

1.11 Численное определение интегралов $J_1 = \int_0^r |E_r^*(\hat{k}^{(1)} \int \hat{k}^{(1)} s)|^2 \left(-\frac{s^{n+2}}{r^{n+1}} - \frac{r^n}{s^{n-1}} \right) ds$ и $J_2 = \int_0^r |E_\theta^*(\hat{k}^{(1)} s)|^2 \left(-\frac{s^{n+2}}{r^{n+1}} - \frac{r^n}{s^{n-1}} \right) ds$.

1.12 Определение $C_n^{(1)}$ и $C_n^{(2)}$, (3.58) и (3.57).

1.13 Определение τ_2 и τ_1 (3.55)-(3.56).

1.14 Определение T_1 и T_1 по τ_1 и τ_2 и зависимостям $\tilde{\lambda}_1(T_1)$ и $\tilde{\lambda}_2(T_2)$.

1.15 Задание зависимостей $\varepsilon_i(T_i)$

1.16 Повторение вычислений, начиная с шага 1.4, получение уточнённых значений R_1^* , ω^* и зависимостей $T_1(r, \theta)$.

2. Две частицы.

2.1 Задание $R_1, R_2, T_{00}, c, I_0, T_{00}$.

Задание зависимостей $\varepsilon_i(\omega)$, $i = 0, 1, 2$

2.2 Определение $\hat{\varepsilon}_i$

2.3 Задание конечных номеров гармоник l^*, n^*, m^* .

2.4 Задание углов β и θ .

2.5 Определение массивов $\{\Omega_{nlm}^{(1)}\}$, $\{\Omega_{nlm}^{(2)}\}$, $\{L_{1l}^m\}$, $\{\delta_{\sigma nl}^m\}$, где $\sigma = |n - l|$.

2.6 Решение системы линейных алгебраических уравнений для определения коэффициентов $B_{lm}^{(1)}$ и $B_{lm}^{(2)}$ методом усечений при условии, что знаменатель g_l не равен нулю (или знаменатель \hat{g}_l не равен нулю при рассмотрении системы с нелинейными свойствами (3.44) - (3.45)). Условие получается из равенства нулю знаменателя g_l (или \hat{g}_l).

2.7 Пошаговое решение - условия электромагнитного резонанса шагом h_R или h_ω .

2.8 Определение $B_{lm}^{(w)i}$ для поля внутри частицы.

2.9 Определение потенциалов Дебая внутри каждой частицы и электрического вектора.

2.10 Определение плотности теплового источника вблизи условия резонанса

$$q_i^* = w_i |E_{il}^*|^2, \text{ где } w_i = \frac{2\omega n_{ir} n_{ia} l_0}{n_{or} c}$$

2.11 Задать число Кнудсена и K_{T_1} и K_{T_2} .

2.12 Задание коэффициентов теплопроводности λ_{i0} , $i = 0, 1, 2$ и зависимостей $\tilde{\lambda}_i(T_i)$.

2.13 Численное определение средних плотностей тепловых источников по

объёму V_i , $\bar{q}_{il} = \frac{S_{V_i} q_{il} dV_i}{V_i}$, $\bar{q}_i = \frac{3}{2l+1} \frac{|B_{l0}^{(w)}|^2}{R_i^3} \int_0^{R_i} \left(|E_{lr}^{(w)i}(r_i)|^2 + |E_{l\theta}^{(w)i}(r_i)|^2 l(l+1) \right) r_i^2 dr_i$, $E_{lr}^{(w)i}(r_i) = \psi_l''(k^{(i)} r_i) + \psi_l(k^{(i)} r)$, $E_{l\theta}^{(w)}(r_i) = \psi_l' \frac{(k^{(i)} r_i)}{r_i}$

2.14 Определение τ_i (3.62)-(3.63). Связать параметры бисферической системы координат с геометрическими параметрами системы.

2.15 Определение τ_i для больших частиц. Перейти от сферических к бисферическим координатам и решение с распределённым тепловым источником.

2.16 Определение T_i по τ_i и зависимостям $\tilde{\lambda}_i(T_i)$. В общем случае интегралы $\int \tilde{\lambda}_i(T_i) dT_i$ определяются численно.

2.17 Задание зависимостей $\varepsilon_i(T_i)$.

2.18 Повторение вычислений, начиная с шага 2.5 получение уточнённых значений R_i^* , ω^* и температур $T_i(r, \theta)$.

Параметр электродинамической нелинейности и размер внутренней области могут выступать в качестве управляющих параметров для теплопереноса и, в случае наличия диффузии или (и) реакции в системе, то массопереноса в системе. Кроме того, возникновение электромагнитного резонанса может привести к

качественному изменению величин определенных переменных, потенциально переводя реакцию из режима активации в режим, не зависящий от температуры.

3.7 Выводы по главе 3

В третьей главе рассматриваются тепло- и массоперенос в нелинейных электромагнитных полях с учётом возникновения электромагнитного резонанса. Решения показывают, что нелинейный характер распространения электромагнитных волн влияет на источники тепла, концентрацию и реакционную скорость, зависящую от температуры и радиуса R_1 . Эти факторы демонстрируют взаимосвязь электродинамических свойств, кинетики реакций и тепловых эффектов, что углубляет понимание поведения системы.

Первым ключевым аспектом главы является изучение моделей тепло-массопереноса, основанных на фундаментальных уравнениях электродинамики и теплофизики. Представлены подходы к описанию распределения температуры и массового потока в дисперсных системах, учитывающие нелинейные свойства материалов. Разработан численно-аналитический метод для определения температурных полей в условиях резонансного поглощения электромагнитного излучения.

Вторым аспектом главы является анализ индуцированных эффектов в высокодисперсных системах. Рассмотрены процессы, связанные с изменением диэлектрических и магнитных характеристик материалов при воздействии электромагнитного поля. Особое внимание уделено изучению механизмов электромагнитного резонанса и его влияния на фазовые переходы и свойства системы.

Третий аспект главы посвящен моделированию нелинейных эффектов, возникающих в результате взаимодействия электромагнитных волн с дисперсными

средами. Приведены результаты исследований, демонстрирующие влияние интенсивности излучения, частоты и геометрических параметров на поведение системы. Включены модели, описывающие процессы формирования кластерных структур и локализации энергии в средах с неоднородной структурой.

Основные результаты, полученные в главе, включают:

- получение условий возникновения резонанса в оптически нелинейной двухслойной среде, отличающиеся от резонанса в линейных системах;
- определение взаимного влияния близко расположенных дисперсных частиц на условия резонанса через коэффициенты поглощения и рассеяния;
- определение существенного влияния коэффициента теплопроводности, зависящего от температуры, в дисперсной системе, находящейся в поле электромагнитного излучения, на её величину;
- моделирование массопереноса типа «реакция-диффузия». Показано, что при резонансе указанный процесс происходит с переходом от режима с температурно-зависимой скоростью реакции (активационный режим) к режиму с температурно-независимой скоростью реакции. Показана также возможность возникновения барьерного эффекта для концентрации;
- моделирование эффекта распространения электромагнитного резонанса среди частиц разного размера и состава, что изменяет их характеристики;
- разработанный численно-аналитический метод определения температуры дисперсной системы в электромагнитном поле, особенностью которого является выделение резонансной гармоники.

ГЛАВА 4. МОДЕЛИРОВАНИЕ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕТОДОВ ТЕОРИИ ПЕРКОЛЯЦИИ И p -АДИЧЕСКОГО АНАЛИЗА

В данной главе рассматривается фазовый переход в системе «жидкость – газ» с использованием древовидных графов, теории перколяции и p -адического анализа.

4.1 Число Кнудсена

При рассмотрении фазовых переходов вида «жидкость – газ» важную роль играет число Кнудсена $Kn = \frac{\lambda}{L}$, где λ – средняя длина свободного пробега газовых молекул, L – характерный размер объекта. При малых числах Кнудсена $Kn \ll 1$ жидкость или газ могут быть описаны в континуальном режиме. В предположении о континууме утверждается, что каждая отдельная точка потока обладает конечным физическим свойствам (температура, давление, плотность и т.д.).

В этих условиях для моделирования потоков применяются уравнения Навье-Стокса, Эйлера, Барнетта, а также замыкающее уравнение плотности среды. В модели континуума поле потока должно находиться в термодинамическом равновесии, чтобы всегда было достаточно времени для образующих его частиц (молекул/атомов), чтобы адаптироваться к окружающим изменениям.

Однако, как известно, предположения о континууме и равновесии могут нарушаться в широком круге условий. Например, длины ударных волн сопоставимы со средним расстоянием между молекулами; следовательно, невозможно иметь термодинамическое равновесие или предполагать континуум. Кроме того, разреженные газовые среды имеют большие межмолекулярные расстояния, что естественно приводит к увеличению числа Кнудсена.

Это ведёт к двум классам методов: детерминистские и стохастические методы. На рис. 4.1 представлена схема для таких методов.



Рисунок 4.1 - Схема моделирование движения жидкостей и газа

Число Кнудсена (Kn) — это отношение средней длины свободного пробега молекул к характерному длиновому масштабу, например, радиусу тела в жидкости. Названо в честь датского физика Мартина Кнудсена (1871–1949). Это число помогает определить, нужно ли использовать статистическую механику или механику сплошной среды для моделирования. Если Kn близко к единице или больше, длина свободного пробега сопоставима с длиной задачи, и континуальная модель потока становится неприменимой.

При описании течений с произвольными числами Кнудсена используются уравнение Больцмана, методы молекулярной динамики, Монте-Карло. При конечных малых числах Кнудсена можно использовать континуальные уравнения, изменяя граничные условия путём введения скачков скольжения. При рассмотрении континуальных уравнений теплопроводности и диффузии в граничные условия вводятся скачки температуры (как это обсуждалось в предыдущей главе) и концентрации. При рассмотрении движения жидких капель в атмосфере такими малыми значениями числа Кнудсена, при котором можно рассматривать континуальные уравнения с модифицированными граничными условиями, считаются значения $0.1 < Kn < 0.3$ (умеренно крупные капли [201]).

Длина свободного пробега молекулы λ — это среднее расстояние, которое пролетает молекула между двумя последовательными столкновениями с другими молекулами. Сечение столкновений зависит от потенциала взаимодействия $u(r)$. В частности, при моделировании бинарных столкновений газовых молекул часто используется потенциал Леннарда-Джонса [202]. Величина $\sigma = \pi d^2$ называется эффективным сечением взаимодействия молекул при рассмотрении модели твёрдых сфер. Длина свободного пробега молекул обратно пропорциональна концентрации молекул. Для частиц в атмосфере при стандартных температуре и давлении, то есть 0°C и 1 атм, величина $\lambda \approx 8 \times 10^{-8} \text{ м}$ (80 нм).

Характерными размерами системы L — это линейные размеры системы, характерные размеры самих частиц и др. А также минимальное (максимальное)

число подсистем, позволяющее системе существовать и функционировать с осуществлением саморегуляции и самовосстановления в рамках своего характерного времени.

В случае идеального газа формула для числа Кнудсена имеет вид:

$$Kn = \frac{k_B T}{\sqrt{2} \pi d^2 p L}$$

k_B – постоянная Больцмана, (1.380649×10^{-23} J/K), d – поперечный размер частицы, p – полное давление.

Число Кнудсена можно использовать для определения степени разрежения потока. Для такой оценки вводятся следующие границы:

1. $Kn < 0.01$: Континуумный режим/ Непрерывный режим
2. $0.01 < Kn < 0.1$: Режим со скольжением
3. $0.1 < Kn < 10$: Переходный режим
4. $Kn > 10$: Свободномолекулярный режим

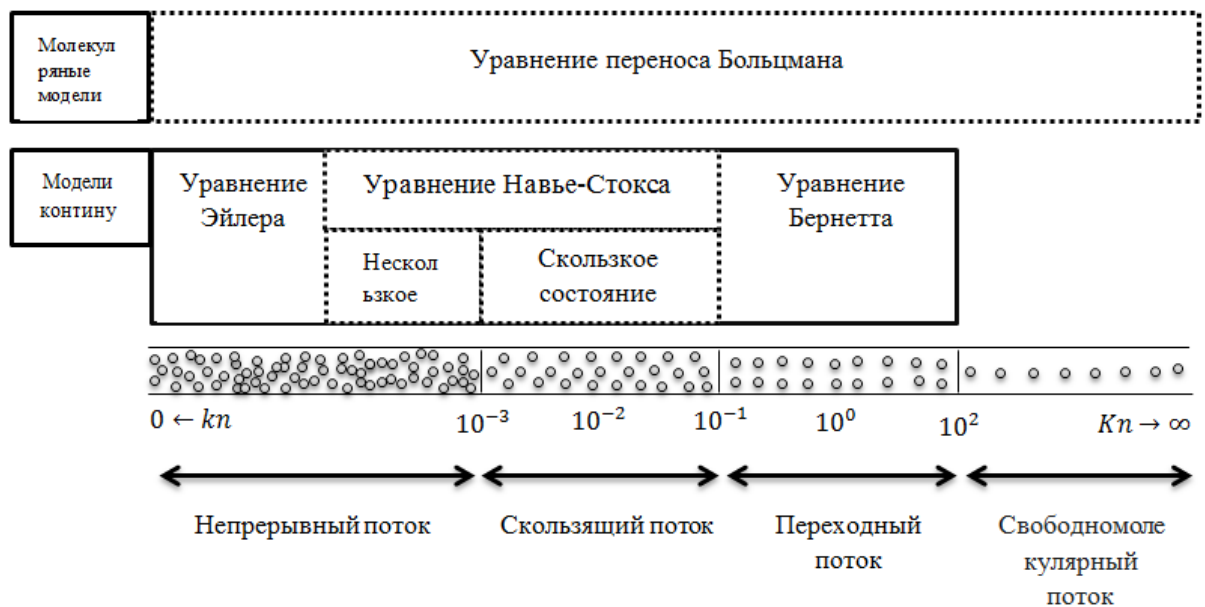


Рисунок 4.2 - Классификация режимов течения с числом Кнудсена

Задачи с большими числами Кнудсена включают расчёт движения пылинок или капель воды в нижней атмосфере и движение спутника через экзосферу;

проектирование устройств микроэлектромеханических систем, где потоки варьируются от континуальных до свободномолекулярных; получение низкой теплопроводности в изоляционных материалах с газами под низким давлением и многие другие.

4.2 Модель фазового перехода в системе «жидкость – газ» в ограниченной области

Далее в этой главе рассмотрена модель фазового перехода в системе «жидкость – газ» в виде древовидного графа. В частности узлы (ячейки) могут быть заданы как для дерева Кейли [203].

Как отмечалось выше, дерево Кейли – это структура без петель. Начинается построение с центрального узла, из которого исходят z ветвей. Конец каждой ветви также является узлом. Таким образом, получается z узлов, которые образуют первую оболочку дерева Кейли. От каждого узла выходит $z - 1$ новых ветвей, образуя $z(z - 1)$ узлов второй оболочки. Этот процесс продолжается до бесконечности. Это приводит к бесконечному дереву Кейли с z ветвями, исходящими от каждого узла.

$$V_n = \bigcup_{m=0}^n W_m,$$

$$L_n = \{l = \langle x, y \rangle \in L \mid x, y \in V_n\}$$

Множество прямых наследников x определяется как

$$S(x) = \{y \in W_{n+1} : d(x, y) = 1\}, x \in W_n$$

Любая вершина $x \neq x^0$ имеет k прямых преемников, а $x^0 - k + 1$.

Для моделирования фазового перехода вершины деревьев Кейли располагаются на границе раздела, а соответственно под его вершинами понимаются небольшие ячейки, в которые попадают испаряющиеся молекулы или находятся молекулы в жидкой фазе [204]. Поскольку в общем случае молекулы меняются, то содержание таких ячеек меняется (то есть, в общем случае, ячейка динамическая). При этом структура гетерогенного приповерхностного слоя может сохраняться на протяжении какого-то количества шагов или изменяться. Подробнее об этом ниже и в пятой главе. Также можно рассматривать дерево Γ_+ только для газовой фазы или дерево Γ_- только для жидкой фазы.

В общем случае, длины рёбер, приходящиеся на жидкую и газовую фазы, могут быть различными. Это может быть определено заданием соответствующей функции на графе. Таким образом, дискретная часть модели включает граф, охватываемый тонким слоем жидкой фазы L_v слой Кнудсена толщиной порядка Kn . Слабо возмущенная газовая смесь за слоем Кнудсена в зависимости от давления может быть описана с использованием дискретного или континуального подхода, а жидкость вне пограничного слоя L_v – на основе континуального подхода. При рассмотрении малых тупиковых пор – на основании дискретной модели в виде графа. Для жидкой смеси можно рассмотреть случаи отдельного молекулярного испарения компонентов и связанного вылета молекул веществ жидкой смеси. В общем случае можно рассматривать несколько деревьев одного вида (в частности деревьев Кейли)[205]. Для проведения численных расчётов может быть использована модификация алгоритма Хошена - Копельмана [188], в который введён слой Кнудсена. Такая модификация алгоритма представлена ниже в главе 5. Отметим, что при рассмотрении испарения из сегментов дисперсной структуры наноразмеров и даже микроразмеров число Кнудсена является величиной порядка и больше 1 при достаточно больших давлениях (порядка и более атмосферного) и, следовательно, слой Кнудсена необходимо учитывать. Слой увеличивается с уменьшением давления в окружающей среде.

Рассмотрим более подробно данную модель

Если испаряются молекулы жидкости или твёрдого вещества, то они испаряются с поверхности или на одно расстояние глубже поверхности (обозначим его l_1) ввиду нечёткости её границы. Испарение молекул (или физических кластеров из нескольких молекул) зависит от температуры, которая во многом определяется мощностью воздействующего электромагнитного излучения, если фазовой переход происходит в электромагнитном поле. В зависимости от геометрии рассматриваемой дисперсной системы плотность теплового источника может быть найдена на основе полученных в третьей главе величин напряжённости электромагнитного вектора (точнее $|E|^2$) или непосредственно заданного q в зависимости от мощности воздействующего лазерного источника I_0 .

В данной модели предполагалось, что вершины деревьев Кейли располагаются на границе раздела, а соответственно под его вершинами имеются небольшие ячейки, в которые попадают или не попадают, испаряющиеся молекулы, а также находятся или не находятся молекулы в жидкой фазе. Поскольку молекулы могут меняться, то содержание таких ячеек может меняться (то есть ячейка, в общем случае, динамическая). В связи с развитием нанотехнологий создаются новые структуры и соответственно метаматериалы, свойства которых в природе встречаются редко или вообще не были обнаружены. В частности, может иметь место трёхслойная система с очень тонкой прослойкой типа графена или метаповерхности, покрытой однородными или неоднородными структурами. Такая разделяющая плёнка может быть перфорированной. Тогда можно рассмотреть фазовый переход первого рода в таких мезо- и наносистемах с применением моделей в виде графов, учитывающих расположение наноотверстий, через которые происходит переход молекул из одной фазы в другую. Несмотря на более сложную, по сравнению с рассмотренной в [202] двухслойной структурой, с математической точки зрения имеется некоторое упрощение, обусловленное фиксированным положением наноотверстий.

Заполнение ячеек можно осуществить, например используя алгоритм Лиса [177]. Задаём вероятность p и в соответствии с алгоритмом заполняем узлы с вероятностью p или оставляем пустыми с вероятностью $1 - p$. Рассматривается полоса $K \times (Kn + nl_1)$ где K – выбранная часть границы поверхности, n – число слоев молекул в жидкой или твёрдой фазе. Расстояние между ячейками (постоянная решётки) определяется расстоянием между молекулами, т. е. расстоянием пропорциональным l_1 .

При рассмотрении только газовой фазы анализируется граф Γ_+^k . Вероятность p зависит от температуры T : $p = \int_{\beta_1}^{\beta_2} f(v_\chi, T) d\mathbf{l}$, где β_1, β_2 – границы изменения скорости молекул, $f(v_\chi, T)$ – функция распределения молекул. Например, как известно, для максвелловского распределения молекул $f(v_\chi, T) = \sqrt{\frac{m}{2\pi kT}} \exp\left(-\frac{mv_\chi^2}{2kT}\right)$. Определение распределения кластеров по размерам в данной модели находится с помощью модификации алгоритма Хошена-Копельмана. Модификация заключается во введении в алгоритм числа Кнудсена и ячеек, в которых находятся как молекулы окружающей среды, так и молекулы испаряющегося вещества. Соответственно число и распределение кластеров зависит от Kn . Процесс расчёта может быть достаточно естественно распараллелен по числу Кнудсена. Модификация алгоритма рассмотрена ниже и в главе 5. После проведения расчётов далее можно определить энтропию системы в соответствии с формулами, приведёнными во второй главе.

При рассмотрении жидкой или твёрдой сферы температура определяется, как это было сделано в третьей главе. При рассмотрении полосы в жидкости прямоугольного слоя решение для температуры можно получить в следующем виде [206]:

$$T = T_0 + \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} C_{nm} X_n(x) Y_n(y)$$

где $C_{nm} = \frac{f_{nm}}{\lambda_{nm}}$, $\mathfrak{X}_{nm} = \mathfrak{X}_{xn} + \mathfrak{X}_{ym}$, $\mathfrak{X}_{xn} = \left(\frac{\pi n}{K}\right)^2$, $\mathfrak{X}_{xn} = \frac{M_{ym}^2}{l_1^2}$, $\text{tg } \mathcal{M}_y = \frac{2\alpha_0 l_1 \frac{M_y}{\lambda}}{M_y^2 - \frac{\alpha_0^2 l_1^2}{\lambda^2}}$,

$$X_n(x) = \cos(\sqrt{\mathfrak{X}_n} X), Y_n(y) = \frac{1}{\sqrt{\mathfrak{X}_{ym} + \frac{\alpha_0^2}{\lambda^2}}} \left(\sqrt{\mathfrak{X}_{ym}} \cos \sqrt{\mathfrak{X}_{ym}} y + \frac{\alpha_0}{\lambda} \cos \sqrt{\mathfrak{X}_{ym}} y \right),$$

α_0 – коэффициент теплообмена на сторонах $y = 0$ и $y = -l_1$, f_{nm} – коэффициенты

разложения в ряд теплового источника $q(x, y)$, $\|y_n\|^2 = \frac{1}{2} \left(l_1 + \frac{2\alpha_0}{\left(\mathfrak{X}_{ym} + \frac{\alpha_0^2}{\lambda^2}\right)} \mathfrak{X} \right)$, $f_{nm} =$

$$-\frac{1}{\sqrt{\frac{K}{2} \|y_n\| \sqrt{\mathfrak{X}_{xn}} \sqrt{\mathfrak{X}_{ym} + \frac{\alpha_0^2}{\lambda^2}}}} \int_0^K \int_0^{l_1} q(x, y) \left(\sqrt{\mathfrak{X}_{xn}} \cos \sqrt{\mathfrak{X}_{xn}} X \right) x \times \times \left(\sqrt{\mathfrak{X}_{ym}} \cos \sqrt{\mathfrak{X}_{ym}} y + \frac{\alpha_0}{\lambda} \sin \sqrt{\mathfrak{X}_{ym}} y \right) dx dy.$$

Предполагалось, что границы $x = 0$, $x = K$ теплоизолированы. Центральные узлы дерева можно расположить на межмолекулярном расстоянии друг от друга.

При необходимости также можно учесть влияние взаимодействия молекул на изменение их положения. При рассмотрении твёрдого кристаллического тела такие отклонения могут быть описаны, например, с помощью уравнения синус-Гордон [206]:

$$\varphi_{tt} - \varphi_{xx} + \sin \varphi = 0 \quad (4.1)$$

Остановимся кратко на выводе (4.1), возвращаясь к первоначальным обозначениям:

$$m y_{n_{tt}} = \frac{-2\pi A b}{a} \sin \left(\frac{2\pi y_n}{a} \right) + k y_{n_{xx}} \quad (4.2)$$

где m – масса частицы, k – коэффициент пропорциональности для силы, действующей между соседними атомами (молекулами), a – шаг кристаллической решетки, A, b – постоянные потенциала взаимодействия, $y_n(t) = x_n(t) - ha$,

$x_n(t)$ – координата n – го атома . Для уравнения (4.1) сделаны следующие обозначения: $y = \frac{2\pi y_n}{a}, t' = \frac{2\pi}{a} \sqrt{\frac{Ab}{m}} t, x' = \frac{2\pi}{a} \sqrt{\frac{Ab}{R}} x$.

В дискретном виде (4.2) имеет вид [181]:

$$m y_{n tt} = -\frac{2\pi Ab}{a} \sin\left(\frac{2\pi y_n}{a}\right) + \frac{k}{h^2} (y_{n+1} - 2y_n + y_{n-1}) \quad (4.3)$$

Здесь в (4.3) первый член учитывает суммарное воздействие конфигурации на выбранную частицу, а второй член – воздействие соседних частиц, h – расстояние между атомами (молекулами). Уравнение (4.2) получено из (4.3) при $h \rightarrow 0$.

В общем случае можно рассматривать различные потенциалы взаимодействия, зависящие от рассматриваемой среды.

Соответственно уравнение движения будет иметь вид:

$$m X_{n tt} = -\frac{\partial V_m}{\partial X} + \mathcal{F}_n \quad (4.4)$$

где V_m – потенциал суммарного воздействия, \mathcal{F}_n – сила, действующая со стороны соседних частиц.

В качестве потенциала взаимодействия в жидкой фазе можно выбрать потенциал Бакингема [207].

$$V(X_n) = \begin{cases} A \exp\left(-\alpha \frac{X_n}{R_m}\right) - \left(\frac{\lambda}{X_n^6} + \frac{\lambda'}{X_n^8}\right) \exp\left(-4 \left(\frac{R_m}{X_n} - 1\right)^3\right), & X < R_m \\ A \exp\left(-\alpha \frac{X_n}{R_m}\right) - \left(\frac{\lambda}{X_n^6} + \frac{\lambda'}{X_n^8}\right), & X_n > R_{min} \end{cases} \quad (4.5)$$

$$\lambda = \frac{\varepsilon \alpha R_m^6}{(\alpha(1+\beta)-6-8\beta)}, \lambda' = \beta R_m^2 \lambda, A = \left(-\varepsilon + (1+\beta) \frac{\alpha}{R_m^6}\right) l^\alpha, \beta = \frac{\lambda'}{\lambda} \frac{R_m^8}{R_m^8}$$

ε – глубина потенциальной ямы, R_m – положение минимума, α – коэффициент крутизны ветви экспоненциального отталкивания.

Соответственно, решение уравнения (4.4) получается с использованием (4.5). В этом случае $\frac{\partial V_m}{\partial X}$ определяется из (4.5), а $\mathcal{F}_n = \gamma(2x_n - x_n - 1 - x_{n+1}) \left(\frac{\alpha A}{R_m} + \frac{12\lambda}{h^7} + \frac{4\lambda'}{h^{10}}(x_{n+1} - x_{n-1}) \right) \exp \left(-4 \left(\frac{R_m}{h^{-1}} \right)^3 \right)$, $x_n < R_m$.

$\mathcal{F}_n = \gamma(2x_n - x_n - 1 - x_{n+1}) \left(\frac{\alpha A}{R_m} + \frac{12\lambda}{h^7} + \frac{4\lambda'}{h^{10}}(x_{n+1} - x_{n-1}) \right) \exp \left(-4 \left(\frac{R_m}{h^{-1}} \right)^3 \right)$, $x_n > R_m$. Здесь h – характерное расстояние между молекулами, γ – коэффициент, зависящий от механизма взаимодействия.

На границе раздела (гиббсовская поверхности раздела) узлы могут быть размещены в соответствии с функцией распределения, зависящей в общем случае от импульса, координаты, времени, температуры.

В равновесной жидкости множитель статистического интеграла, зависящий от импульса, вычисляется аналитически и равен $\left(\frac{2\pi mkT}{h} \right)^{\frac{3N}{2}}$, где N – общее число частиц, h – число частиц в подсистеме.

Двухчастичная функция распределения, зависящая от координат, может быть найдена из уравнения Кирквуда-Боггса [208]:

$$kT \ln g_2(1,2, \xi) = -\xi \phi(1,2) - \zeta \int_0^\xi \xi \phi(1,3) g_2(1,3, \xi) \cdot (g_2(2,3) - 1) d\vec{3} d\xi \quad (4.6)$$

При выводе (4.6) потенциал представлялся в виде $\phi_N = \sum_{j=2}^N \sum_{k=j+1}^N \phi(j,k)$, где

ξ – параметр.

Функция распределения и корреляционная функция на поверхности отличается от объёмной функции, но в первом приближении можно полагать $g_{2s} = g_2$.

Для определения $g_2(\mathbf{r})$ также можно использовать её определение через число частиц Δn_i в сферическом слое Δr на расстоянии r от i –той частице [209].

$$g_2(r) = \frac{V}{4\pi r^2 N^2} \left(\sum_{i=1}^N \frac{\Delta n_i(r)}{\Delta r} \right),$$

где V – объём жидкой фазы, N – число частиц, $g_2(r)$ – усреднённая по частицам радиальная парная корреляционная функция, определяющая вероятность расположения молекул на расстоянии от r до $r + \Delta r$. Для жидкостей такая функция имеет несколько максимумов. Поэтому для $g_2(r)$ можно записать:

$$g(r) = \sum_i \frac{n_i}{\sqrt{2\pi \bar{\xi}_i^2}} \exp\left(-\frac{(r-r_i)^2}{2\bar{\xi}_i^2}\right) \quad (4.7)$$

где r_i – положение максимума, n_i – координационное число, $\bar{\xi}_i^2$ определяет ширину максимума.

Соответственно, функция распределения имеет вид:

$$f_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = f_1(\mathbf{r}_1) f_2(\mathbf{r}_2) g_2(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|),$$

где $f(\mathbf{r}_j)$ – одночастичная функция. Функция $g_2(r)$ может быть найдена с помощью структурного фактора:

$$S(\mathbf{k}) = 1 + e^{-jkr} g_2(r) dr, j = \sqrt{-1} \quad (4.8)$$

\mathbf{k} – волновое число.

С помощью волнового числа можно получить интегральное уравнение для $g_2(r)$, которые для изотропной системы имеет вид:

$$g_2(r) = 1 - 4\pi\rho \frac{1}{k} \frac{d}{dk} \int_0^\infty (g(r) - 1) \cos kr dr$$

Данное уравнение позволяет получить модельный вид для функции $g_2(r)$, если известна плотность ρ .

Отметим, что для ряда жидкостей расположение максимумов известно экспериментально. Например, для воды в состоянии с большой потенциальной энергией, они располагаются при 3.1 \AA , 6.3 \AA , 9.5 \AA , 12.5 \AA .

При рассмотрении перфорированного покрытия узлы располагаются в соответствии с отверстиями. В этом случае в предположении очень малых

отверстий не требуется определять $g_2(r)$, что упрощает задачу. В том и другом случае можно рассматривать как молекулярное, так и кластерное испарение.

Рассмотрим более детально алгоритм. Узлы решётки расположены друг от друга на расстоянии числа Кнудсена $\frac{Kn}{2}$. Поскольку длина свободного пробега зависит от температуры, то $Kn = Kn(T)$. Если бы узлы заполнялись плотно, то занятые газом узлы распределялись бы согласно вероятности $q_g = \frac{p_0}{p_s + p_0}$, где p_0 – давление окружающего газа, $p_s = p_s(T)$ – давление насыщенного пара над поверхностью жидкости. Соответственно, на долю испарившихся молекул при плотной упаковке остаётся вероятность $q_v = \frac{p_s}{p_s + p_0}$. Выбранная высота для проведения расчётов в области газа $l_2 = Knw$ рассчитывается по максимальной скорости, $l_2 = v_{max}\Delta t$, где Δt – единица времени. Поскольку в действительности между молекулами имеется расстояние, то заполнение пустых узлов молекулами пара происходит с вероятностью $\tilde{q}_v = f_s(\gamma, T)g_2(x)$, где $\gamma = \frac{v}{v_{max}}$. Здесь через $f_s(\gamma, T)$ обозначена функция распределения частиц по скоростям. Например, для максвелловской плотности распределение формула имеет вид:

$$f_s = \left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{mv^2}{2kT}}, f_s = \frac{n_j}{N}$$

n_j – число частиц с данной скоростью v_j , $v \geq 0$. Поскольку для проведения расчётов скорость должна быть ограничена некоторой максимальной скоростью, то приближённо данное распределение можно записать в виде:

$$\tilde{f}_s = \left(\frac{m}{2\pi kT}\right) e^{-\frac{m(v_{max})^2}{2kT}},$$

Здесь и в дальнейшем при расчётах предполагается, что размер поверхности испарения в длину значительно больше, чем в ширину.

Можно рассматривать и другие функции распределения $\tilde{f}_s(\gamma)$ по тому или иному статистическому закону вдоль $\chi: \tilde{f}_s = (\gamma_i, \chi_i)$, где χ_i – координата узла на

поверхности, как отмечалось выше. В более простом варианте можно принять в качестве скорости её среднюю величину: $\bar{v} = \sqrt{\frac{8kT}{\pi m}}$. Тогда \tilde{q}_v равна:

$$\tilde{q}_v = \frac{p_s}{p_s + p_0} \frac{4}{\pi^2} e^{-\frac{4}{\pi}} g_r(x) \quad (4.9)$$

Формула (4.9) получается при интегрировании f_s в двумерном случае в малом диапазоне скорости $[\bar{v}, \bar{v} + \Delta v]$. Аналогично с использованием функции распределения заполняются узлы молекулами газа. Соответственно, вероятность заполнения узлов или ячеек для молекул газа равна $\tilde{q}_g = \frac{p_0}{p_s + p_0} \frac{4}{\pi^2} e^{-\frac{4}{\pi}} g_{r1}(x)$. Таким образом, в узлах теперь стоят следующие обозначения: 0 – пустой узел, 2 – молекула воздуха или другого газа (полагается, что поверхность жидкости для молекул газа непроницаема), 1 – молекула пара. Отметим, что как частный случай, можно рассматривать модель покоящегося газа со средней скоростью, равной нулю.

Далее, для исследования возможных структур в ограниченной области вблизи мезо- или наноструктуры с испаряющейся поверхностью, используется модификация алгоритма Хошена – Копельмана, в котором метки относятся к 3 видам узлов вместо двух [177].

Сформулируем основные шаги алгоритма **при заданном числе Кнудсена**:

- если у текущего узла нет соседних занятых узлов, он считается новым кластером и получает новую метку k ;
- размер нового кластера фиксируется как $M(k_y) = 1$ или $M(k_v) = 1$ в зависимости от типа узла;
- если у узла только один занятый сосед с той же меткой, узлы объединяются в один кластер, и размер кластера увеличивается на 1: $M(k_y) = M(k_y) + 1$ для газа или: $M(k_v) = M(k_v) + 1$ для пара;
- если у узла несколько соседей одного типа, он объединяет их кластеры в один, получая общую метку и пересчитанный размер.;

- при наличии соседнего узла другого типа узел получает новую метку кластера;
- если у узла несколько соседей разных типов, предполагается, что он принадлежит новому кластеру и получает новую метку;
- суммирование проводится отдельно для узлов типа «пар» и «газ». Чтобы кластеры с разными метками объединить, их метки исправляются: в массивы M_g и M_v заносятся правильные метки со знаком минус.

Таким образом, можно рассмотреть структуру вблизи испаряющейся поверхности. Соответственно, можно рассмотреть влияние на неё числа Кнудсена и температуры, вероятность достижения верхней границы в зависимости от \tilde{q}_l и, следовательно, от давления насыщенных паров p_s .

Зафиксировав узлы, в которых находится молекулы пара и распределив с той же вероятностью p_s , можно рассмотреть следующий шаг по времени Δt и также рассмотреть получающую структуру для пара. При проведении расчётов с дальнейшими шагами по времени нужно учитывать изменение температуры окружающей среды. Как следствие, нужно учитывать изменение средней длины свободного пробега. Однако, наибольший интерес для описания фазового перехода представляет именно приповерхностный слой.

При рассмотрении перфорированного слоя можно рассмотреть испарение из разных отверстий и сравнить полученные результаты. Это позволяет исследовать испарение с различных частей поверхности.

Поскольку при $Kn \ll 1$ среда является почти континуальной, то имеется достаточно много столкновений между молекулами. Поэтому полученные структурные решения нужно уточнить. Для этого можно использовать потенциал взаимодействия. В качестве такого потенциала можно применить потенциал Леннарда-Джонса. Потенциал Леннарда-Джонса для молекул одного типа имеет вид:

$$U_i(r) = 4\xi_i \left(\left(\frac{\sigma_i}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_i}{r} \right)^6 \right), i = 1, 2 \quad (4.10)$$

Потенциал Леннарда-Джонса для молекул разных типов запишется так:

$$U_{12}(r) = 4\xi_{12} \left(\left(\frac{\sigma_{ij}}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{ij}}{r} \right)^6 \right) \quad (4.11)$$

Здесь r – расстояние между частицами, ε – глубина потенциальной ямы, σ – расстояние, на котором энергия взаимодействия равна нулю, минимум потенциала (точка, в которой происходит изменение сил притяжения на силы отталкивания) находится в точке $r_{min} = \sqrt[6]{2} \sigma$, величины ε_{12} , σ_{12} приближённо определяются следующим образом: $\varepsilon_{12} = \sqrt{\varepsilon_1 \varepsilon_2}$, $\sigma_{12} = \frac{\sigma_1 + \sigma_2}{2}$.

Учёт столкновений усложняет задачу. Сначала область внешней среды разбивается на квадраты размером $\frac{Kn}{2}$. Затем положение узлов выбирается в каждой клетке случайным образом. Далее, как и ранее, узлы заполняются и начинается процедура определения кластеров. Может оказаться, что расстояние между некоторыми заполненными узлами $r < r_{min}$, причём возможны случаи: $r < r_{min1}$, $r < r_{min2}$, $r < r_{min12}$.

Если какое-либо из этих условий для текущего узла выполняется, то возможны следующие случаи:

1. Вблизи, но на расстоянии больше, чем соответствующее условие $r < r_{min}$, имеется пустой узел. Тогда в него переходит соответствующая молекула 1 или 2, а текущий узел становится свободным;
2. Вблизи текущего узла нет свободных узлов. Тогда текущий узел или оба узла, расстояние между которыми меньше r_{min} , переходят в новое положение внутри квадратов так, чтобы выполнялось условие в безразмерном виде $\frac{r}{r_{min}} > 1$.

Таким образом, в данном случае в процессе поиска кластеров система узлов может изменяться, т. к. учитывается динамика процесса. Таким образом, модификация алгоритма Хошена-Копельмана предполагает введение двух занятых

узлов в соответствии с вероятностями q_g и q_v . При учёте взаимодействия двух частиц необходимо учитывать потенциал взаимодействия.

После определения кластеров можно определить энтропию Колмогорова-Синяя для данной системы, как отмечалось во второй главе:

$$H(Q) = - \sum_{i=1}^N p(Q_i) \log p(Q_i)$$

где $Q = Q_1 \cup Q_2 \cup \dots \cup Q_r$ – разбиения на кластеры.

Таким образом, по определённым кластерам можно определить термодинамические функции. Соответственно, частичная функция модели Поттса равна:

$$Z_{potts} = Q_p^{\sum_s m_s},$$

где каждый узел решетки может быть в состоянии 0,1,2. $n_s = \langle m_s \rangle$ – среднее число кластеров. Аналог свободной энергии Гиббса имеет вид [168]:

$$F_{potts} = -k + (Q_p - 1) \sum_s n_s$$

где число кластеров определяется с помощью данного алгоритма.

Данный подход может быть использован для исследования фазовых переходов вблизи поверхности в системах «жидкость - газ» и «твёрдое тело - газ», кроме того, данный подход эффективен при рассмотрении неоднородной окружающей атмосферы. Таким образом, окружающая атмосфера является ещё более неупорядоченной, например «газ - твёрдые взвешенные частицы». Рассматривается движение или переход частиц в локальной области. При моделировании переходов можно задать узлы определённым образом и задать узлы в соответствии с Kp . Затем можно определить энтропию для заданных частиц. Как отмечалось выше, данный метод позволяет рассмотреть структуру вблизи фазового перехода. При наложенном внешнем электромагнитном поле, возможно, что испаряющиеся молекулы или их комплексы будут двигаться в определённом направлении.

Знание того или иного расположения узлов U_3 в соответствии с вероятностью q_v в общем количестве узлов позволяет вычислить величину $\frac{U_3}{U}$ и соответственно концентрацию испаряющихся веществ вдоль данного направления. По заполнению узлов дерева Γ_+ (в частности, дерева Кейли Γ_+^K) делается вывод о распространении молекул пара в том или ином направлении, или в той или иной локации.

4.3 Некоторые аспекты рассмотрения задачи фазового перехода с использованием p -адического анализа

Во второй главе рассмотрены основные понятия p -адических чисел и p -адического анализа, которые широко применяются в теории чисел, динамических системах, квантовой и статистической физике, теории неупорядоченных систем, криптографии и других областях. Такой подход позволяет установить новые закономерности, которые могут не проявляться при использовании чисел архимедовой метрики. Это, в частности, следует из теоремы Островского (1916 г.), в которой доказывалось, что каждое нетривиальное абсолютное значение для рациональных чисел Q_p эквивалентно либо обычному действительному абсолютному значению, либо p -адическому абсолютному значению.

При рассмотрении фазового перехода (испарения) на молекулярном уровне в небольшом объёме можно провести моделирование структуры молекулярных траекторий и получить моментальные картины. Это обсуждалось в параграфе 4.2. Соответственно, дальше можно провести статистическую обработку полученных результатов по координатам или по виду траекторий.

В работе А. Ю. Хренникова [210] рассматривается подход к теории вероятностей, когда пространство и функции (в случае квантовой интерпретации-волновые функции) являются p -адическими. В статье автор опирается на определение Мизеса: статистическая вероятность события — это предел

относительных частот появления события, когда объём статической выборки стремится к бесконечности. Иными словами, это определение формулируется как принцип статистической стабилизации частот.

Поскольку относительная частота $w_i = \frac{n_i}{n}$, где n — общее число частот n_i , то, как отмечает автор, относительные частоты являются рациональными числами. Следовательно, опираясь на теорему Остроградского, стабилизацию относительной частоты можно рассматривать не только в вещественной метрике, но и в p -адической. Таким образом, может оказаться, что у случайной выборки отсутствует стабилизация относительных частот в вещественной метрике, но она существует в p -адической метрике.

Автор статьи [210] также отмечает: "Наибольший интерес представляют метрические топологии на Q_p , задаваемые абсолютными значениями. В силу теоремы Островского оказывается, что кроме обычной вещественной топологии, где $\rho(x, y) = |x - y|$, существуют только p -адические топологии, $p = 2, 3, \dots$, где $\rho(x, y) = |x - y|_p$. Далее автор указанной статьи приводит такой пример для двух видов объекта случайным образом разбросанных на некоторой части плоскости.

В вещественной теории вероятностей величина $P(E) = 0$ не позволяет различить события, число которых в бесконечной генеральной совокупности может быть для событий E_1 и E_2 достаточно большим и различным, но вероятности которых при очень больших n очень малы. То есть получается $P(E_1) = P(E_2) = 0$. В p -адической теории вероятности это не так.

Например, имеются события E_1 и E_2 , причём E_1 реализуется $n_1 = 2^k$ раз, а $E_2 - n_2 = \left(\sum_{j=0}^k 2^j \right)^2$ раз, причём $N = \left(\sum_{f=0}^k 2^f \right)^2$. В вещественной теории $P(E_1) = P(E_2) = 0$. В p -адической теории вероятностей при $p = 2$ $P(E_1) = 0$, а $P(E_2) = -1$. Также вероятности получаются, т.к в Q_2 $2^k \rightarrow 0$ при $k \rightarrow \infty$, а $1 + 2 + 2^2 + 2^3 + \dots + 2^n + \dots = -1$.

В p -адической вероятности $P(E)$ может быть отрицательной или больше единицы, т. к. является символом для обозначения последовательностей относительных частот. Из этих результатов можно сделать вывод что в данной метрике можно различать более тонкие эффекты, связанные, например со структурой той или иной системы, или дальними эффектами того или иного процесса. Например, хорошо известно, что при максвелловском распределении частиц по скоростям, число частиц с большими скоростями очень мало, однако при фазовых переходах их роль может быть заметной (например, для нагрева окружающей среды).

Вернёмся к примеру автора [206] из двух видов А и В. Разброс происходит сериями p объектов. Длина серии (степень p) также формируется случайно в зависимости от длины предыдущей серии и выбора числа из датчика случайных чисел. Автором статьи доказано, что для любых датчиков случайных чисел $j = 0, 1$ и $i = 1, 2$ имеет место статистическая стабилизация относительных частот для первого и второго видов $w_m^{(1)} = w_m^{(2)} = \frac{n_m^{(2)}}{N_m}$ (обозначение m – это первые m серий) в p -адической топологии. Соответственно, p -адические вероятности получаются как пределы $P^{(1)} = \lim w_m^{(1)}$, $P^{(2)} = \lim w_m^{(2)}$:

$$P^{(1)} = \frac{\left(\sum_{n=1}^{\infty} (1 - j_n) P^{i_n} \right)}{\left(\sum_{n=1}^{\infty} P^{i_n} \right)} \quad (4.12)$$

$$P^{(2)} = \frac{\left(\sum_{n=1}^{\infty} j_n P^{i_n} \right)}{\left(\sum_{n=1}^{\infty} P^{i_n} \right)}$$

Также доказана стабилизация частот при случайном выборе какого-либо из двух признаков системы или объекта. Пусть j – датчик случайных чисел,

отвечающий за выбор признака. Случайный признак выпадает сериями, имеется также датчик случайных чисел $i = 0, 1, \dots, p - 1$, так что длина следующей серии равна $i_n P^{n-1}$, $n = 1, 2, \dots$. Тогда вероятности равны:

$$P^{(1)} = \frac{\left(\sum_{n=1}^{\infty} (1 - j_n) i_n P^{n-1} \right)}{\left(\sum_{n=1}^{\infty} i_n P^{n-1} \right)} \quad (4.13)$$

$$P^{(2)} = \frac{\left(\sum_{n=1}^{\infty} j_n i_n P^{n-1} \right)}{\left(\sum_{n=1}^{\infty} i_n P^{n-1} \right)}$$

В вещественной топологии в этих условиях стабилизация частот, в общем случае, отсутствует.

Из формул (4.12)-(4.13) непосредственно следует, что, несмотря на то, что значения вероятностей могут быть больше 1 или меньше нуля, вероятность для всего пространства событий остаётся, равной 1. Мы здесь подробно описали результаты указанной выше статьи, потому что они могут быть применены для обработки траекторий движения молекул при фазовых переходах, полученных с использованием того или иного алгоритма, в нашем случае - модифицированным алгоритмом Хошена - Копельмана. Рассматривая траектории в системе перехода "жидкость (твёрдое вещество)- газ", можно найти вероятности тех или иных траекторий. Это можно сделать в вещественной топологии. Однако как отмечалось на примере, в р-адическом подходе можно различать часть событий по их вероятности, которые неразличимы в вещественной теории вероятностей. Выбирая серии для молекул газа и жидкости, заполняющих пространство вблизи границы фазового перехода, можно определить вероятности, соответствующие стабилизирующимся частотам. Ввиду различия между количеством молекул газа

(2) и молекул пара (1), необходимо ввести весовые коэффициенты β_1 и β_2 в формулы (4.13). Тогда должно выполняться условие:

$$\beta_1 P^{(1)} + \beta_2 P^{(2)} = 1 \quad (4.14)$$

Задавая β_2 , например, $\beta_2 = 0.9$, можно определить β_1 :

$$\beta_2 = \frac{1 - \beta_2 P^{(2)}}{P^{(1)}} \quad (4.15)$$

Таким образом, можно определить вероятности заполнения пограничного пространства на основе геометрически-вероятностного p -адического подхода.

Во второй главе рассматривались различные формулы для определения энтропии, как очень важной характеристики кинетических процессов. Достаточно общее выражение для энтропии получено, например, в [211]. Оно имеет вид:

$$H(X) = \frac{1}{n(X)N} \sum_f \mu(T^N B_k^f) \log_p \left(\mu(T^N B_k^f) \right), \quad (4.16)$$

где фазовое пространство P^1 разбивается на $n(X)P^k$ шаров с радиусом $\frac{1}{p^k}$, мера μ нормирована так, что $\mu(X) = n(X)$, $n(X)$ – индекс многообразия $X = P^1$. Под действием преобразования T^N шар радиуса $\frac{1}{p^k}$ переходит в шар радиуса $\frac{1}{p^{k+mN}}$, т.е. степень сдвигается на mN .

Учитывая каноническую запись для p -адического числа

$$X = p^{-n}(a_0 + a_1 p + \dots + a_{n-1} p^{n-1}),$$

можно получить более простую формулу:

$$H(X) = - \sum_{X \in \Omega} \left(\sum_{i=0}^{k-1} \frac{a_{i-k}}{p^{k-i}} \log_2 \left(\sum_{i=0}^{k-1} \frac{a_{i-k}}{p^{k-i}} \right) \right) \quad (4.17)$$

К (4.17) добавляется также необходимое условие

$$\sum_{X \in \Omega} \left(\sum_{i=0}^{k-1} \frac{a_{i-k}}{p^{k-i}} \right) = 1$$

тогда можно определить величину информации, формула для которой в условиях независимости величин X и Y , запишется в виде:

$$I(X, Y) = - \left(\sum_{X \in \Omega} \left(\sum_{i=0}^{k-1} \frac{a_{i-k}^{(1)}}{p^{k-i}} \log_2 \left(\sum_{i=0}^{k-1} \frac{a_{i-k}^{(1)}}{p^{k-i}} \right) \right) \right) \times \\ \times \left(1 - \sum_{X \in \Omega} \left(\sum_{i=0}^{m-1} \frac{a_{i-m}^{(2)}}{p_2^{m-i}} \log_2 \left(\sum_{i=0}^{m-1} \frac{a_{i-m}^{(2)}}{p_2^{m-i}} \right) \right) \right) \quad (4.18)$$

Поскольку фазовый переход непосредственно связан с изменением энергии, то для моделирования этого процесса можно рассматривать квазигиббсовскую меру. Такая мера связана с моделью Поттса [212].

Ранее мы рассматривали верхнюю часть дерева Кейли $\Gamma_+^k(V, L)$. Аналогично можно рассмотреть дерево траекторий во внешней среде в виде того или иного древовидного графа с вершинами на границе фазового раздела и вблизи фазового перехода. В дереве, длина кратчайшего пути от X к Y называется расстоянием $d(x, y)$ между вершинами x и y . Обозначим X° начальную вершину из множества V (множество вершин). Теперь рассмотрим p -адическую модель Поттса, разработанную для состояний спинов. Для древовидного графа также вводятся множества:

$$W_n = \{X \in V \mid d(X, X^\circ) = n\}, V = \bigcup_{m=V}^n W_n, L_n = \{l = (x, y) \in L \mid X, Y \in V_n\}$$

(X, B) – измеримое пространство, B – алгебра подмножеств X . Тогда $\mu: B \rightarrow Q_p$ является p -адической мерой, если для любых $A_1, A_2, \dots, A_m \in B$, таких, что $A_i \cap A_j \neq \emptyset (i \neq j)$ справедливо равенство:

$$\mu \left(\bigcup_{i=1}^n A_i \right) = \sum_{i=1}^n \mu(A_i)$$

Соответственно, для p -адической вероятностной меры $\mu(X) = 1$. Это видно и из приведённых выше примеров.

Рассмотрим p -адическую модель Поттса в применении к фазовому переходу первого рода. Пусть $\phi = \{0, 1, 2, \dots, q\}$, $q \geq 2$ является пространством состояний. В данном случае состояние может определяться значением температуры T_{ic} для конденсированной фазы и T_{ig} для газовой фазы. Значения q присваиваются

вершинам графа в соответствии со значением температуры. В жидкой фазе нумерация во избежание разночтений даётся в направлении возрастания температуры: $T_{ic} < T_{jc}$ для $i < j$. Рёбро в жидкой фазе указывает на переход от одной вершины к другой вследствие того или иного процесса. При последовательном нагревании в сторону увеличения температуры это просто одномерная цепь. Аналогично можно рассмотреть граф состояний, зависящих от температуры, для газовой фазы вблизи поверхности раздела. Обозначим весь граф $\Gamma^K = \{V, L\}$. Какая-либо конфигурация σ на множестве вершин V определяется как функция $X \in V \rightarrow \sigma(X) \in \phi$. Также определяются конфигурации σ_n и ω_n на V_n и W_n соответственно. Следуя модели Поттса, запишем объединение конфигураций σ_{n-1} и ω_n в виде:

$$(\sigma_{n-1} \cup \omega_n) = \begin{cases} \sigma_{n-1}(X), & \text{если } X \in V_{n-1} \\ \omega_n(X), & \text{если } X \in W_n \end{cases} \quad (4.19)$$

Также можно рассмотреть Γ_1^K граф, представляющий собой множество состояний на поверхности жидкости. В этом случае это совокупность вершин, которые для определённости обозначим q_{ci} . Они соединены с вершинами q_{gi} . Пример такого графа приведен на рис. 4.3. В простейшем случае это дерево.

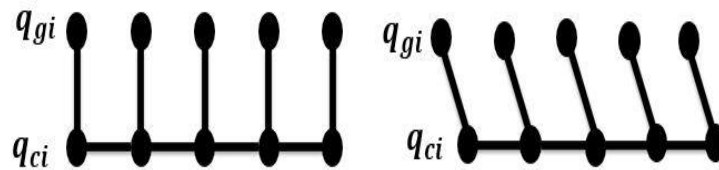


Рисунок. 4.3 Пример графа $\Gamma_1^K(q_{ci}, q_{gi})$

Если в газовой фазе никаких дополнительных процессов не происходит, то простейший граф с вершинами q_{gi} при поверхностном слое q_{ci} более правильно представить графом, приведенном на втором рисунке 4.3. Он также является деревом.

Здесь наклон рёбер обусловлен тем, что обычно в газовой фазе вблизи поверхности конденсированного вещества имеет место аккомодация и температура уменьшается.

Гамильтониан системы для модели Поттса имеет вид:

$$H(\sigma) = \mathcal{N} \sum_{(x,y) \in L_n} \delta\sigma(x), \sigma(y) \quad (4.20)$$

где δ – символ Кронекера, \mathcal{N} – константа связи, $\sigma \in \Omega_{V_n}$, $\Omega_{V_n} = \Omega_{V_{n-1}} \times \Omega_{V_n}$, множество всех конфигураций, включающих вершины U_p совпадают с $\Omega = \phi^{U_p}$, то есть в нашем случае, $U_p = V_n$.

Пусть имеется функция $h_x = (h_{0x}, h_{1x}, \dots, h_{qx})$, где $h_{ix} \in Q_p$, $i \in \phi$, $x \in V \setminus \{X^{(0)}\}$. Тогда на множестве Ω_{V_n} p -адическая мера вероятности $\mu_h^{(n)}$ запишется так [168]:

$$\mu_h^{(n)}(\sigma) = \frac{1}{Z_n^{(h)}} \exp\{H_n(\sigma)\} \prod_{x \in W_n} h_{\sigma(x), x} \quad (4.21)$$

где $Z_n^{(h)}$ – нормирующий коэффициент, равный соответственно:

$$Z_n^{(h)} = \sum_{\sigma \in \Omega_{V_n}} \exp\{H_n(\sigma)\} \prod_{x \in W_n} h_{\sigma(x), x}$$

Если для некоторой функции n меры $\mu_h^{(n)}$ удовлетворяют условию совместимости мер, то существует p -адическая мера вероятности μ_h . Она называется p -адической квазигиббсовой мерой для соответствующей p -адической модели Поттса. Предельная p -адическая мера - последовательность (4.21) – p -адическая мера Гиббса. В нашем случае можно представить гамильтониан в виде:

$$H_n = H_{nc} + H_{ng} \text{ или } H_n = H_{nc} + H_{ns} \quad (4.22)$$

где H_c относится к конденсированной фазе, H_g — к газовой и H_s — к конденсированной фазе на её поверхности. Тогда, выделяя из трехарного дерева для газовой фазы или для поверхности структуры из множества вершин, получим H_{ng} или H_{ns} в виде суммы $(1 + 1 + 1 + \dots + 1) N_g$ (или множество N_s). Также для H_{nc} получаем сумму некоторого количества единиц, соответствующее совпадению конфигурации $\sigma_{(x)}$ и $\sigma_{(y)}$. Соответственно в формуле для меры (4.21) получаем степени числа p . Задавая функцию h_x с компонентами $h_{ix} \in Q_p$, в пределе $n \rightarrow \infty$ получается мера μ_h . Рассматривая другую функцию $S_x(S_{0x}, S_{1x}, S_{2x}, \dots, S_{gx})$, где $S_{ix} \in Q_p$, в общем случае, можно получить меру $\mu_s \neq \mu_h$, что будет соответствовать квазифазовому переходу в системе. Если одна из мер ограничена, а другая неограничена, то существует фазовый переход.

Также можно определить квазигиббсовскую меру для выбранных графов. При этом узлы сетки определяют состояние q . Необходимо иметь в виду, что в действительности это динамическая система, т. к. в узел решётки попадают в зависимости от времени разные молекулы, хотя структура сохраняется. Определить меру можно, следуя рассуждениям статьи [38]. В частности, на каждом уровне i , это могут быть деревья Кейли. Для таких графов показано, что возможна ситуация, когда одна мера ограничена, а другая мера неорганичена [38,39]. Можно также для каждой температуры рассмотреть характеристики каждой молекулы. Тогда состояния такой системы будут описываться q_{ijk} , где j — номер молекулы, k — характеристика, обусловленная скоростью.

С другой стороны, функция распределения $f(x, t)$ молекул по траекториям с учетом их возможной диффузии может быть найдена с помощью оператора Владимирова. Оператор Владимирова является p -адическим аналогом оператора процессов диффузии и теплопереноса и имеет вид [39]:

$$D_x^\gamma f(x, t) = \frac{1}{\Gamma_p(-\gamma)} \int_{Q_p} \frac{f(x) - f(y)}{|x-y|^{1+\gamma}} d\mu(y) \quad (4.23)$$

где $\Gamma(-\gamma) = \frac{p^\gamma - 1}{1 - p^{-1-\gamma}}$, $\mu(x)$ – мера Хаара. Соответственно уравнение диффузии имеет вид:

$$\frac{d}{dt} f(x, t) = -D_x^\gamma f(x, t) \quad (4.24)$$

Техника решения такого уравнения с помощью фурье-преобразования представлена, например в [213].

В этой статье показано, что фундаментальное решение уравнения (4.25) имеет вид:

$$f(x, t) = \int_{Q_p} \exp | - \tilde{\rho} (|\xi|_p t) \chi(-\xi x) d\mu(\xi) \quad (4.25)$$

где $\tilde{\rho}(|\xi|_p) = \int_{Q_p} \rho(|\xi|_p) \left(1 - \frac{\chi}{\xi x}\right) d\mu(x)$, $\frac{\chi}{\xi x}$ – аддитивный характер поля p -адических чисел, $\chi(x) = \exp\left(2\pi i \sum_{j=\mathbb{E}}^{-1} X_f p^f\right)$.

Следовательно, задавая начальное значение $f(0, x)$, можно учесть и влияние механизма диффузии на распределение. В формуле (4.24) рассматриваются безразмерные X, t , в качестве t_0 берётся характерное время $t_0 = \frac{L^2}{D_0}$, где L – характерный размер, D_0 – коэффициент диффузии.

Таким образом, применение p -адической метрики приводит к некоторым новым моделям в виде графов, а вероятностная p -адическая мера показывает качественную возможность фазового перехода и соответственно нарушения внутренней структуры системы. Уравнение для функции распределения позволяет оценить динамику молекулярных траекторий вследствие диффузии.

Поскольку в общем случае имеют место столкновения молекул в слоях газа при удалении от поверхности, то такую ситуацию можно моделировать одной из

ветвей дерева, приведённого в статье [38]. При этом эта ветвь разветвляется по тому же закону построения. Следовательно, в этом случае существуют различные квазигиббсовские меры, что свидетельствует о возможности фазового перехода.

4.4 Выводы по главе 4

В четвертой главе исследуются методы теории перколяции и р-адического анализа, которые применяются для моделирования фазовых переходов первого рода в высокодисперсных системах. Основное внимание уделено описанию процессов формирования кластеров и структуры фазовых областей в неоднородных средах с учётом числа Кнудсена.

С учётом применения этих подходов и применения кинетических моделей в данной главе были получены следующие основные результаты:

- предложено уравнение для моделирования взаимодействия молекул на поверхности жидкости с использованием потенциала Бакингема;
- предложена модификация перколяционного алгоритма Хошена – Копельмана, включающая число Кнудсена, для определения возможных кластеров испаряющегося вещества и окружающего газа вблизи поверхности испарения. Такой алгоритм позволяет учитывать также различные примеси в газовой фазе в приповерхностном слое и потенциалы взаимодействия;
- предложена модель состояний системы в виде древовидного графа вблизи поверхностного слоя и рассмотрена р-адическая модель Поттса, которая позволяет определить энтропию и вероятности возможных траекторий испаряющегося вещества в ограниченной области вблизи поверхности фазового перехода.

Представленные результаты формируют базу для построения моделей, отражающих структурные изменения в дисперсных средах, а также имеют потенциал для применения их для решения различных прикладных задач, например, в такой области, как нанотехнология.

ГЛАВА 5. АЛГОРИТМЫ И КОМПЛЕКС ПРОГРАММ

В третьей главе мы привели некоторые результаты расчётов для температуры в дисперсной системе, находящейся в поле элетромагнитного излучения.

Наш программный код в среде MATLAB моделирует взаимодействие электромагнитного излучения с двумя материалами, аланином и MBVA. Он рассчитывает плотность теплового потока и поглощение энергии на основе различных свойств, включая электрическую проницаемость, электропроводность и угловую частоту. Также учитываются мощность лазера, длина волны и время работы. Программа генерирует комплексные параметры, зависящие от частоты, (m_1 и m_2) для обоих материалов, которые затем используются для расчета плотностей теплового потока q в двух областях. Для визуализации зависимости между плотностью теплового потока и параметром нелинейности в обеих областях создано несколько графиков, которые помогают изучить поглощение энергии лазером. Затем мы вводим параметры теплоемкости, плотности, коэффициенты теплопроводности, время для расчета температур в разные времена. Мы рассчитываем и выводим на график распределения температуры в двух областях с разными временными константами. Вычисляются промежуточные переменные и экспоненциальные коэффициенты затухания, которые затем используются для определения значений температуры для различных сценариев. Код генерирует графики для визуализации температур в различных временных рамках, размерах и областях, предоставляя информацию о поведении температуры во времени и пространстве.

При моделировании фазового перехода вблизи поверхностного слоя в нашей работе предлагается и используется модифицированный алгоритм Хошена-Копельмана для поиска иллюстрирующих возможные траектории кластеров на сетке. Пошаговое описание алгоритма имеется в четвёртой главе.

5.1 Блок-схема модификации алгоритма модели

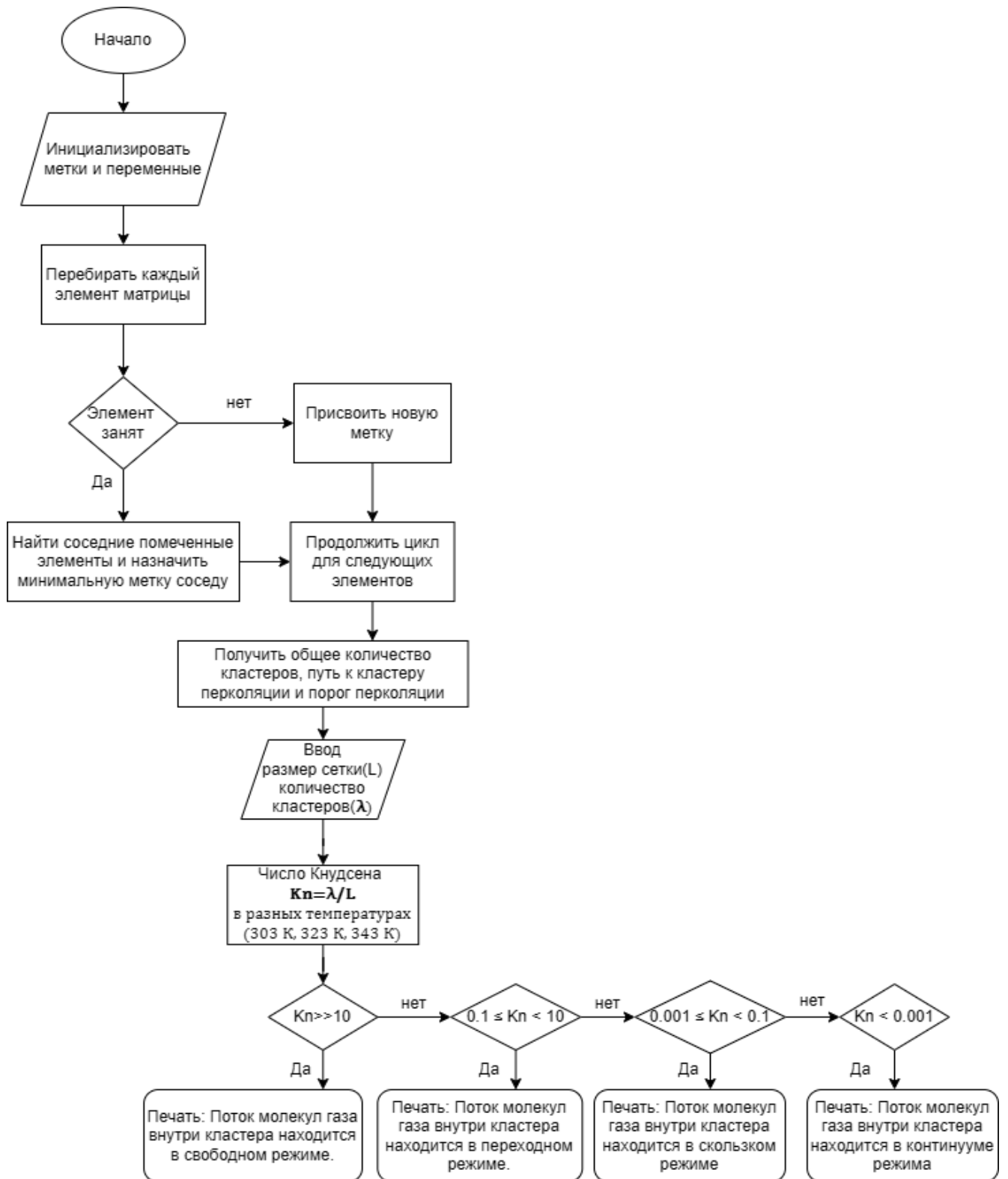


Рисунок 5.1 - Блок-схема алгоритма для модели фазового перехода

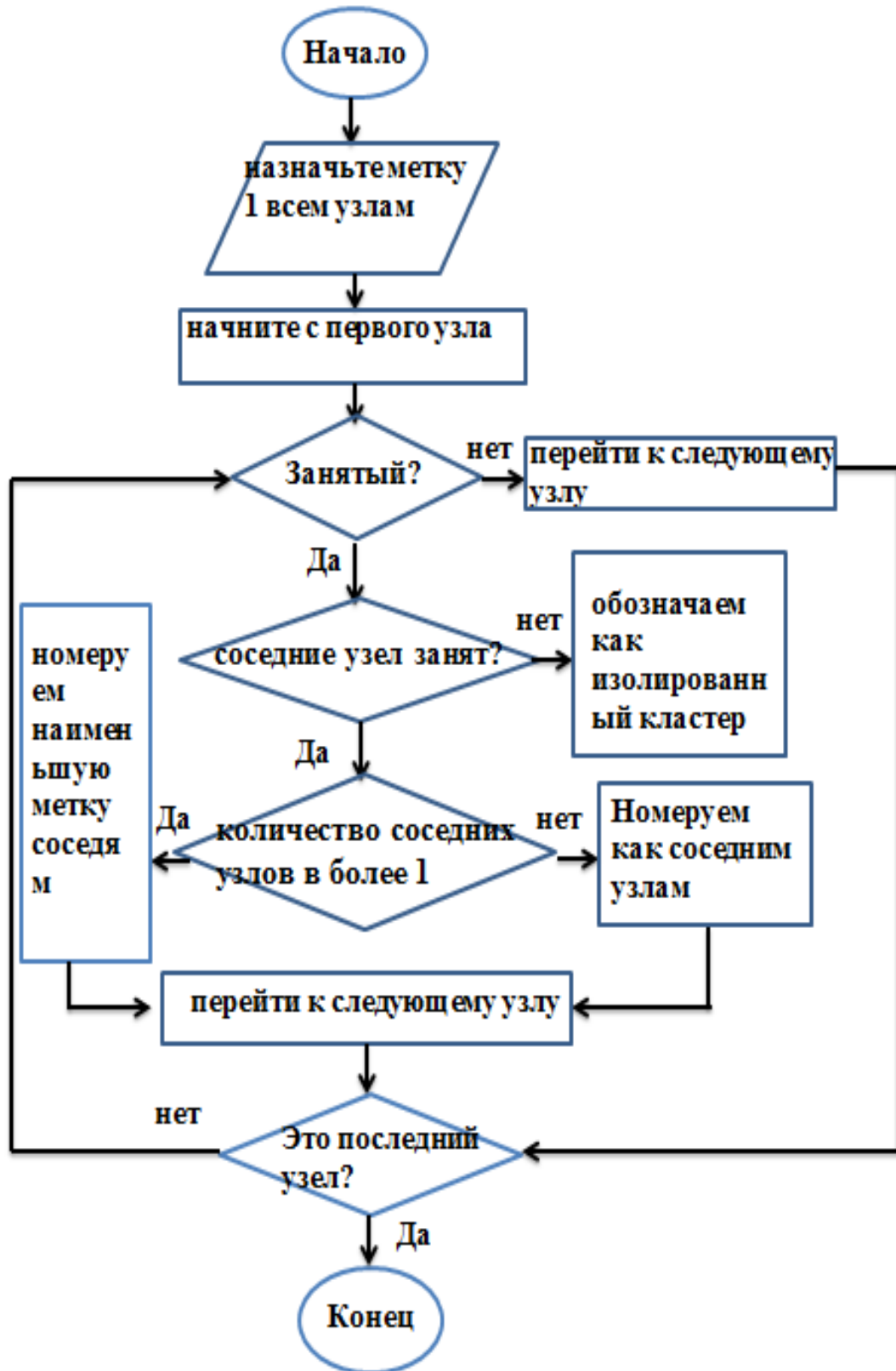


Рисунок 5.2 - Схема-блок модификации алгоритма Хошена-Копельмана

5.2 Комплекс программ

Для реализации алгоритмов используются разработанные программы на языке программирования MATLAB r2021a.

MATLAB коды для модификации расчётов по тепло-и массопереносу приведены в **Приложении В**.

Код начинается с определения нескольких параметров, относящихся к маломощному гелий-неоновому лазеру мощностью 50 МВт и длиной волны 633 нм, соответствующей красному спектру. Он устанавливает начальное время равным нулю и вычисляет угловую частоту, используя формулу $\omega = \frac{2\pi c}{\lambda}$. Скорость света определяется как 299 792 458 м/с. Волновое число $k = \frac{2\pi}{\lambda}$, а значениям диэлектрической проницаемости для аланина и МВВА присвоены конкретные значения. Значения электропроводности для обоих материалов также определены.

Код включает в себя два параметра теплового воздействия, представляющие первоначальное тепловое воздействие лазера на аланин и МВВА, установленные на 22°C и 25°C соответственно. Приведены значения массы для наноразмерного фрагмента аланина и 10-нанометрового фрагмента МВВА. Сложные расчеты позволяют определить два значения массы на основе диэлектрической проницаемости и электропроводности аланина. Код генерирует ряд нелинейных параметров, которые представляют различные уровни нелинейности.

Затем программа вычисляет плотность теплового потока для внутренней области с учетом ранее определенных параметров. Генерируется несколько графиков для визуализации зависимости между нелинейностью и плотностью теплового потока для различных материалов, а также энергии, поглощаемой лазером каждой областью.

В последующих разделах комплекса определяются параметры, относящиеся

к удельным теплоемкостям и плотностям аланина и МВВА, а также коэффициентам теплопроводности. Программа вычисляет конкретные геометрические параметры, включая радиус внутренней и внешней областей, с последующими вычислениями с использованием тригонометрических функций для получения дополнительных параметров, имеющих отношение к анализу теплопередачи.

В ходе моделирования рассчитываются зависящие от времени тепловые характеристики, основанные на конкретном времени тестирования, с использованием функций экспоненциального затухания для моделирования того, как тепло распространяется с течением времени. Наконец, программа вычисляет и строит график температур в обеих областях за различные промежутки времени, эффективно демонстрируя влияние поглощенной энергии на изменение температуры рассматриваемых материалов. Определены дополнительные параметры, связанные с энергией активации и молярной газовой постоянной, а код завершается расчетами, которые обобщают тепловое поведение аланина и МВВА в ответ на лазерное облучение. Разработанный программный комплекс позволяет при загрузке других данных получать результаты по температуре и концентрации других дисперсных систем.

MATLAB коды для модификации алгоритма Хошена-Копельмана приведены в **Приложении Г**.

Этот код в среде MATLAB моделирует и анализирует двумерную сетку, представляющую различные фазы вещества, в частности пустое пространство, пар и газ, при различных значениях температуры и давления. Моделирование начинается с определения ключевых параметров, таких как размер сетки (в примере, 10×10), диапазон температур в градусах Кельвина (в примере, 303 К, 323 К и 343 К) и соответствующие значения давления пара и воздуха. Для упрощения дальнейших расчетов в коде используется постоянная Больцмана и заданный размер частиц. Генерируется случайная сетка, в которой каждой ячейке

присваивается значение 0 (пустая ячейка), 1 (пар) или 2 (газ). Затем эта сетка отображается с использованием цветовой схемы, где белый цвет обозначает пустые ячейки, черный - пар, а серый - газ, а также цветная полоса для иллюстрации этих категорий.

Для улучшения понимания код помечает каждую ячейку таблицы соответствующим значением, используя разные цвета текста для наглядности на фоне цветов фона. Затем алгоритм Хошена-Копельмана используется для маркировки кластеров подключенных ячеек для пара и газа, инициализируя массив эквивалентностей для отслеживания взаимосвязей между метками. Алгоритм выполняет итерацию по сетке, присваивая метки на основе соседних ячеек и разрешая любые эквивалентности для обеспечения согласованной маркировки кластеров. После завершения процесса маркировки размеры идентифицированных скоплений пара и газа вычисляются и отображаются на консоли.

Код также генерирует второй рисунок для визуализации помеченной сетки с аналогичной цветовой схемой и линиями сетки для лучшей наглядности. Каждая ячейка сетки снова помечается на основе исходных значений, сохраняя четкость информации. После визуализации программа выполняет зависящие от температуры вычисления для каждой определенной температуры. Шаг по времени может быть обусловлен вылетом молекул, как указывалось в главе 4, что может привести к изменению расположения траекторий для испаряющихся молекул. Также он может быть обусловлен изменением температуры вследствие нагревания конденсированной фазы, что, в свою очередь приводит к изменению расположения траекторий для испаряющихся молекул. Таким образом, структура приповерхностного слоя изменяется. Программа вычисляет вероятности каждой фазы на основе давлений пара и воздуха и выводит эти вероятности на консоль. Кроме того, программа вычисляет число Кнудсена как для пара, так и для воздуха, классифицируя поведение молекул на такие режимы, как непрерывный, скользящий, переходный или свободномолекулярный, на основе рассчитанных

чисел Кнудсена. Вспомогательные функции включены для упрощения процессов поиска корневых меток и объединения эквивалентностей, что обеспечивает общую надежность и эффективность моделирования. В целом, этот код обеспечивает всесторонний анализ распределения кластеров в сетке, а также учитывает влияние температуры и давления на поведение молекул.

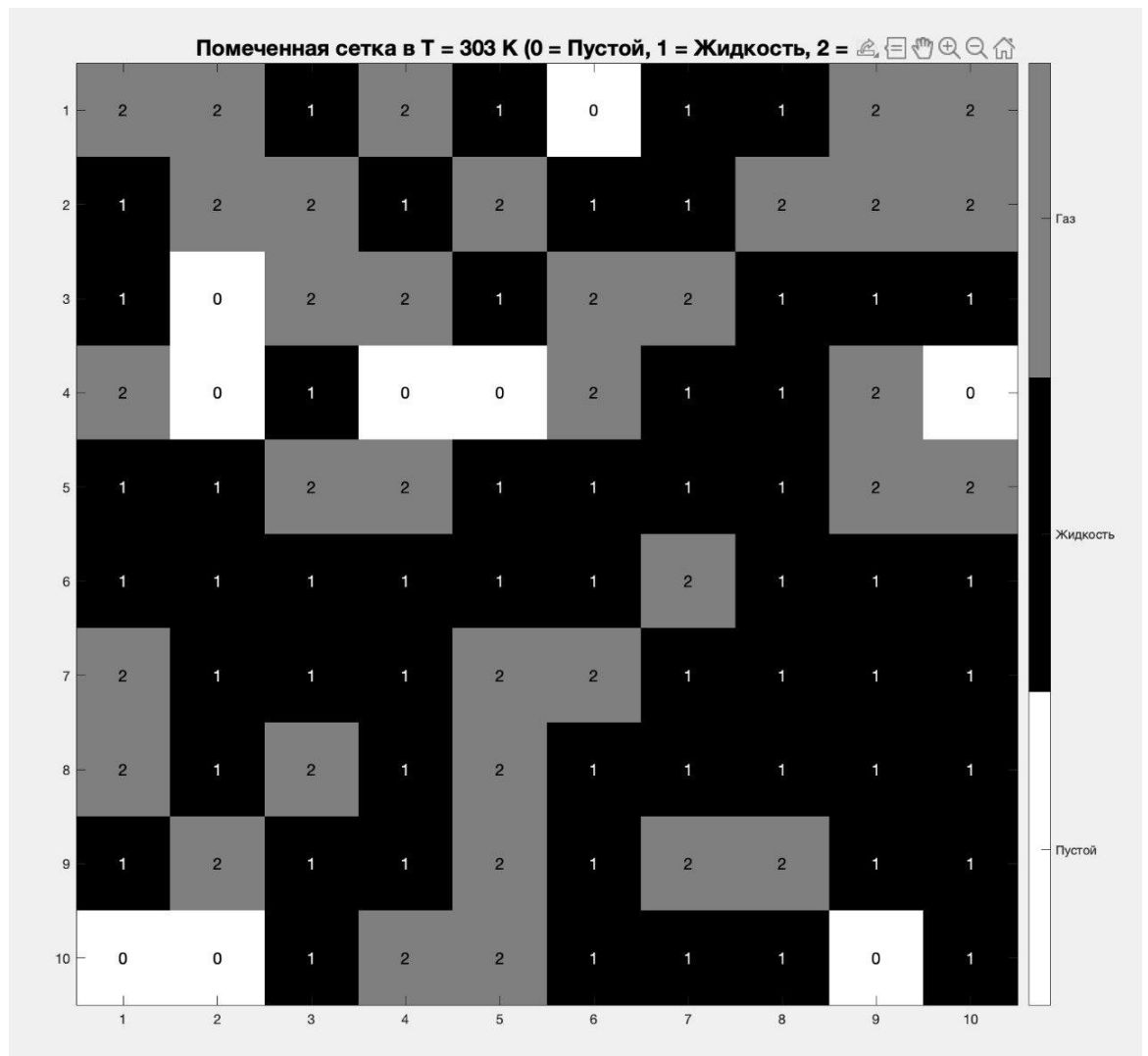


Рисунок 5.3 - Распределение кластеров для модифицированного алгоритма Хошена-Копельмана при 303 К

На рисунке 5.3 показана последовательность номеров кластеров в цветных узлах. Черный узел - это узел с молекулой жидкости под номером 1. Серый узел - это узел с молекулой газа под номером 2. При температуре 303 К, размер кластера жидкости составляет 56 молекулы и размер кластера газа – 35 молекул. Молекулы

жидкости или пара находятся в переходном режиме, так как их число Кнудсена (Kn) равно 1.03×10^{-1} . Аналогично, молекулы газа или воздуха тоже находятся в переходном режиме, с числом Кнудсена ($Kn = 1.03 \times 10^{-1}$).

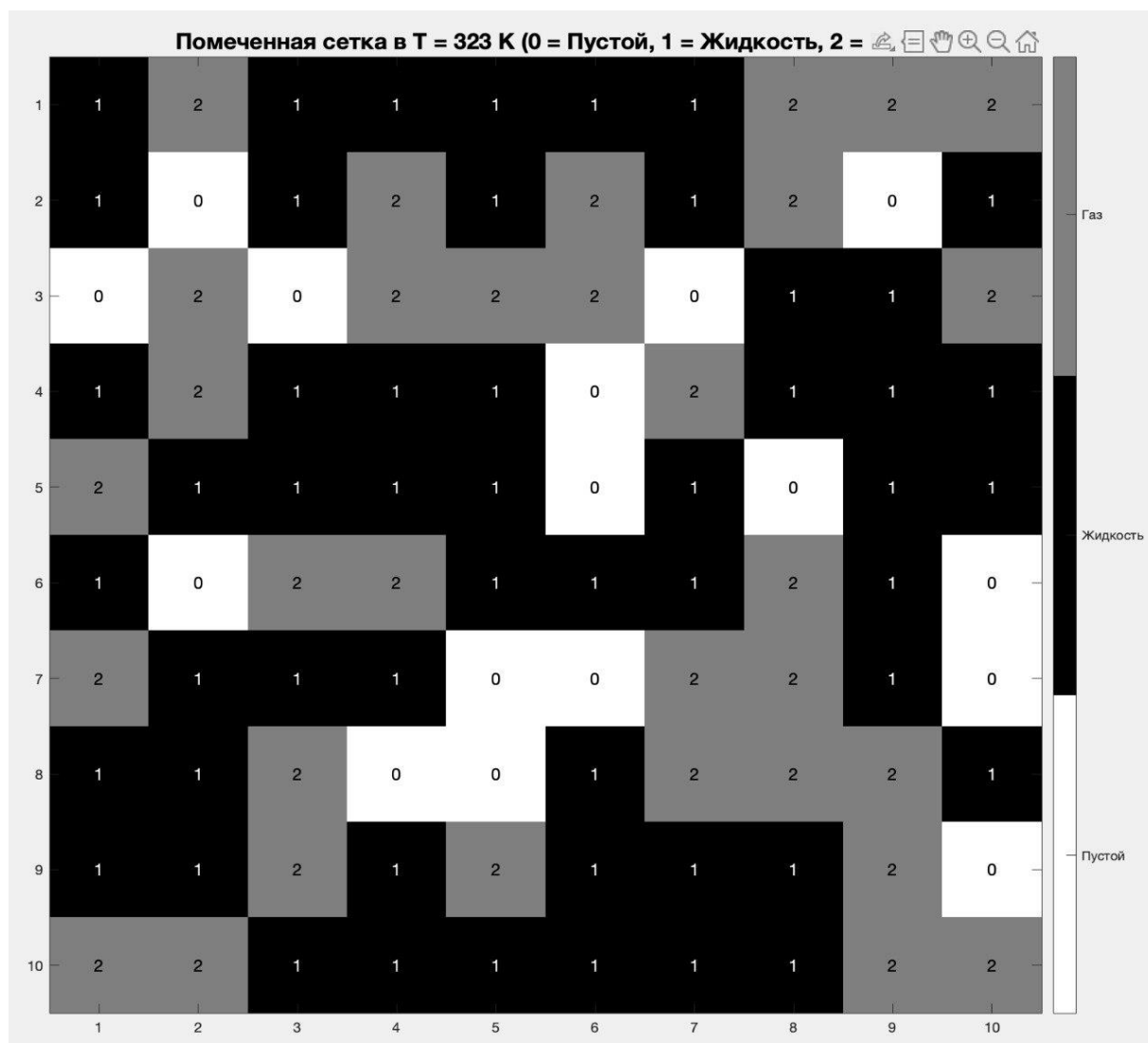


Рисунок 5.4 - Распределение кластеров для модифицированного алгоритма Хошена-Копельмана при 323 К

На рисунке 5.4 показана при температуре 323 К, размер кластера жидкости составляет 52 молекул и размер кластера газа – 32 молекул. Молекулы пара находятся в переходном режиме, так как их число Кнудсена (Kn) составляет $Kn = 1.10 \times 10^{-1}$. Молекулы воздуха также находятся в переходном режиме, с числом Кнудсена ($Kn = 1.10 \times 10^{-1}$).

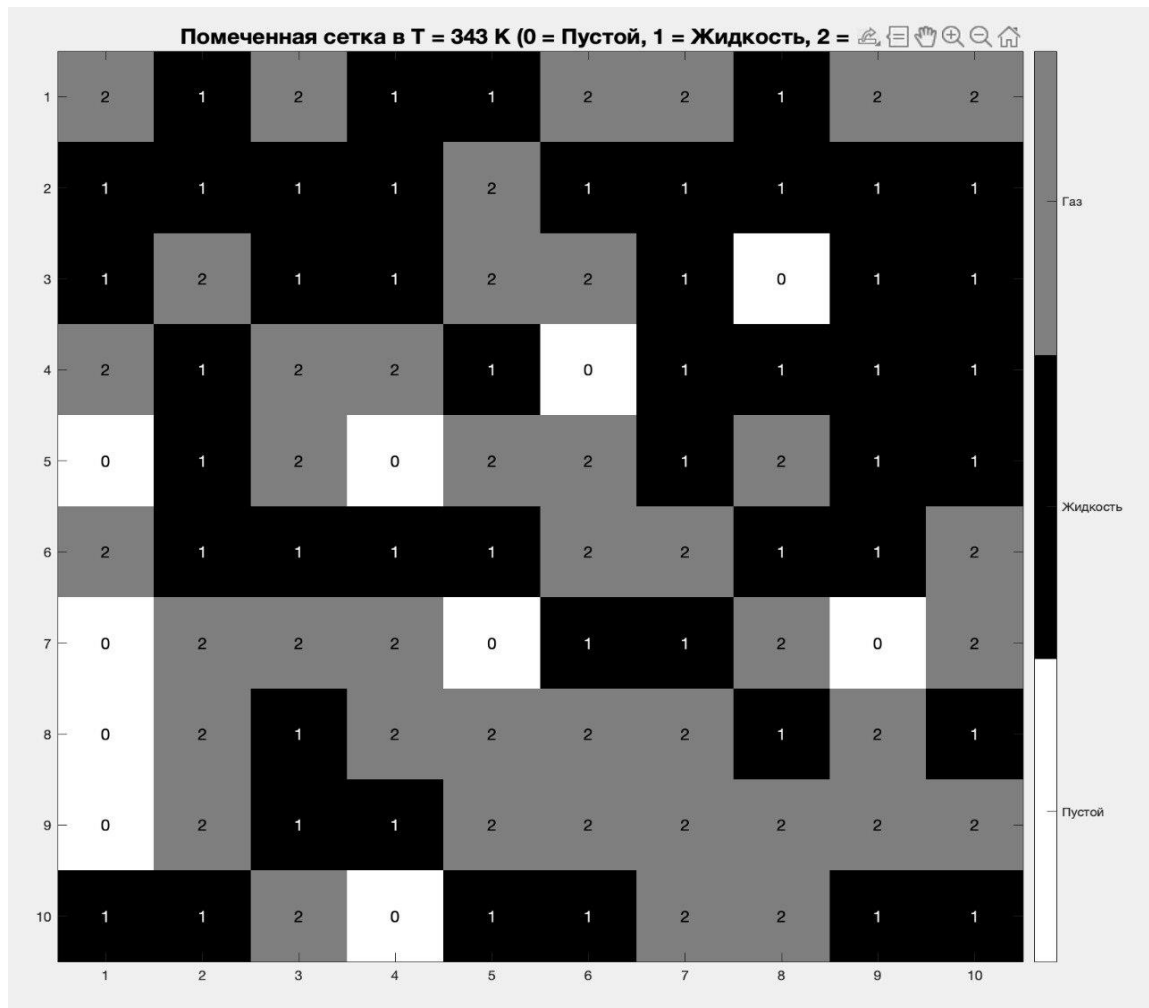


Рисунок 5.5 - Распределение кластеров для модифицированного алгоритма Хошена-Копельмана при 343 К

На рисунке 5.5 показана при температуре 343 К, размер кластера жидкости составляет 48 молекул и размер кластера газа – 42 молекулы. Молекулы пара находятся в переходном режиме, поскольку их число Кнудсена (Kn) равно $Kn = 1.17 \times 10^{-1}$. Молекулы воздуха также находятся в переходном режиме, так как их число Кнудсена составляет $Kn = 1.17 \times 10^{-1}$. Здесь мы придерживаемся классификации Дерягина – Галояна – Яламова. Согласно ей при фазовом переходе первого рода в дисперсных системах переходный режим имеет место при числах Кнудсена в пределах от 0,1 до 0,3. При давлении в окружающей среде, равном 1 атмосфере такое число Кнудсена имеет место при испарении из щелевого канала с длиной 0,5 – 0,6 микрон. Интересно отметить, что количество больших кластеров

пара $n \geq 3$ по отношению к общему числу кластеров пара зависит от температуры. При температуре $T=303$ К и при $T=323$ К такое отношение равно 0,222, а при $T=343$ К оно равно 0,364. Такое довольно большое изменение может быть объяснено тем, что при $T=343$ К для испарения молекул воды (для которых проводился расчёт) заметным становится конвективное движение смеси. При расчёте с числами Кнудсена, соответствующими континуальному режиму, показывает сохранение этой тенденции.

5.3 Выводы по главе 5

Пятая глава посвящена разработке алгоритмов и программного комплекса для моделирования процессов тепло- и массопереноса, а также фазовых переходов в высокодисперсных системах. Основное внимание уделено описанию структуры и функционала программного комплекса, а также проверке его работоспособности на тестовых примерах.

Первым важным аспектом главы является разработка алгоритмов численного моделирования. Рассмотрены подходы к решению нелинейных уравнений, описывающих процессы тепломассопереноса и электромагнитного взаимодействия. Включена модификация алгоритма метода Хошена – Копельмана.

Второй аспект главы касается структуры программного комплекса. Представлены блок-схемы основных модулей, включая расчетные блоки для анализа температурных полей, массовых потоков и фазовых переходов. Описаны принципы интеграции с внешними библиотеками и интерфейс для визуализации результатов.

Третий аспект главы — тестирование программного комплекса. Проведены вычислительные эксперименты, демонстрирующие эффективность разработанных алгоритмов. Приведены примеры моделирования фазовых переходов и

теплопереноса в дисперсных средах, подтверждающие корректность программного обеспечения.

Связь главы 5 с темой диссертации заключается в создании инструмента для анализа процессов в высокодисперсных системах. Разработанный комплекс программ обеспечивает возможность численного моделирования и анализа сложных физических процессов, что является важным, как в теоретическом аспекте, так и для приложений.

Обзор главы 5 используется в диссертации для демонстрации практической применимости разработанных методов. Программный комплекс служит основой для проведения вычислительных экспериментов, необходимых для верификации теоретических моделей.

В пятой главе получены следующие основные результаты:

- сформулированы основные шаги для программной реализации предложенного нами численно-аналитического метода определения температуры дисперсной системы в электромагнитном поле, особенностью которого является выделение резонансной гармоника;

- представлена структура модифицированного алгоритма Хошена-Копельмана;

- на основе разработанных алгоритмов разработан комплекс программ;

- проведены вычислительные эксперименты для тепло- и массопереноса для двухслойной частицы в поле электромагнитных волн и для определения количества, размера и распределения кластеров испаряющегося вещества и окружающего газа в приповерхностном слое вблизи границы фазового перехода.

Кластерный анализ показал влияние температуры на структуру гетерогенного приповерхностного слоя вблизи границы фазового перехода. Полученные результаты могут быть использованы в таких областях, как нанотехнология, химическая инженерия, биофизика и других.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

Основные результаты и выводы заключаются в следующем:

1. Выполнена научно-квалификационная работа, решающая актуальную задачу моделирования фазовых переходов и нелинейного теплопереноса в мезо- и наносистемах под воздействием электромагнитного поля. Решаемая задача имеет важное фундаментальное значение для развития такой отрасли знаний как прикладная математика и прикладное значение, например, для приборостроения и нанотехнологий.
2. На основе обзора литературы и её анализа показано, что, несмотря на достаточно хорошо изученные закономерности фазовых переходов первого рода, развитие подходов на основе современных математических методов для исследования нелинейных процессов тепло- и массопереноса и фазовых переходов под действием электромагнитного поля и в непосредственной близости от границы раздела фаз имеет высокую значимость.
3. Для определения особенностей теплопереноса и фазовых переходов первого рода в электромагнитном поле предложена математическая модель для определения условий возникновения электромагнитного резонанса, отличающаяся возможностью учитывать нелинейную зависимость диэлектрической проницаемости от электрического вектора. Показано отличие условия возникновения резонанса в оптически нелинейной среде от условий линейной теории. Получены условия возникновения резонанса в оптически нелинейных двухслойных сферических частицах, а также условия для определения величины взаимного влияния близко расположенных дисперсных частиц на условия возникновения резонанса через коэффициенты поглощения и рассеяния, входящие в решения в виде рядов.
4. Найдены плотности тепловых источников вблизи условий возникновения электромагнитного резонанса в зависимости от размера частиц и физических

характеристик вещества. С использованием нелинейного уравнения теплопроводности с найденными тепловыми источниками, зависящими от параметра оптической нелинейности, разработан численно-аналитический метод определения температуры в дисперсной системе в нелинейном электромагнитном поле, особенностью которого является выделение резонансной гармоники.

5. На основе разработанных модели и метода выявлены закономерности и особенности индуцированного теплопереноса в двухслойных мезо- и наносистемах, а также в системе с двумя сферическими частицами, взвешенными в континуальной среде, с различными оптическими и теплофизическими свойствами. Показано, что в общем случае имеет место качественное различие зависимостей температуры от координат в разных областях рассматриваемых систем, обусловленное видом температурной зависимости коэффициентов теплопроводности. В частности, может иметь место стабилизация температуры в одной из областей, несмотря на электромагнитный резонанс. Показана возможность распространения электромагнитного резонанса по полидисперсной системе в процессе её нагрева. В двухслойной сферической частице (размер внешней области значительно превышает размер внутренней области) рассмотрен массоперенос вида «диффузия -реакция», обусловленный нагреванием вследствие воздействия электромагнитного поля. Показано, что при электромагнитном резонансе массоперенос происходит с переходом от активационного режима к режиму с температурно-независимой скоростью реакции. Показана также возможность возникновения барьерного эффекта для концентрации вблизи границы перехода из внутренней во внешнюю область.

6. Для моделирования фазового перехода первого рода в приповерхностном слое разработана модификация перколяционного алгоритма Хошена – Копельмана. В модификацию включено число Кнудсена с целью рассмотрения различных режимов испарения, а также три состояния ячеек: 0-пустая ячейка, 1-испаряющееся вещество, 2-окружающий газ. Заполнение ячеек происходит с

использованием зависящей от температуры функции распределения по скоростям. Проведение моделирования показало, что с увеличением температуры увеличивается процент более длинных кластеров, соответствующих молекулам испаряющегося вещества.

7. Предложена модель фазового перехода первого рода для системы «жидкость-газ» в ограниченной области вблизи поверхности испарения мезо- или наноструктуры, особенностью которой является использование древовидных графов состояний, зависящих от температуры, на поверхности испарения и для газовой фазы вблизи поверхности фазового перехода. С использованием построенной модели предложен подход применения р-адического анализа и модели Поттса для выявления деталей фазовых переходов первого рода в высокодисперсных системах и определения энтропии. Подход опирается на статистическое понятие вероятности в р – адическом анализе и квазигиббсовскую меру.

8. На основе разработанных моделей, метода и алгоритмов с использованием ПО MatLab r2021a создан комплекс программ, позволяющий проводить вычисления температуры, концентрации, молекулярных траекторий в высокодисперсных системах при переходе «жидкость – газ» под воздействием электромагнитного поля.

9. Результаты, полученные в диссертации, рекомендуется использовать в учебном процессе в вузе при подготовке бакалавров и магистров по таким направлениям как «Информатика и вычислительная техника», «Прикладная математика», «Прикладная информатика», «Физика и технология наноструктур», «Лазерная техника и лазерные технологии».

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Mehran, K. *Statistical Physics of Particles* / K. Mehran. – Cambridge: Massachusetts Institute of Technology press, 2021. – 330 P.
2. Poincaré, H. *The Three-Body Problem and the Equations of Dynamics: Poincaré's Foundational Work on Dynamical Systems Theory* / H. Poincaré. – Djursholm: Acta Mathematica, 2017. – Vol. 13. 270 P.
3. Ландау, Л. Д. *К проблеме турбулентности* / Л. Д. Ландау – М.: Наука, 1944. – Vol. 44. 339 С.
4. Hopf, E. *A mathematical example displaying features of turbulence* / E. Hopf // *Commun. Pure Appl. Math*, New York, Издательство: John Wiley & Sons Publisher, Inc. (USA), – 1948. – Vol. 1. – P. 303–322.
5. Ohkitani, K. *Study of the Hopf functional equation for turbulence: Duhamel principle and dynamical scaling* / K. Ohkitani // *Phys. Rev. E* 101, American Publisher: American Physical Society. 2021. – P. 1–32.
6. Lorenz, E. N. *Deterministic nonperiodic flow* / E. N. Lorenz // *J. Atmos. Sci.*, Boston. Издательство: American Meteorological Society, 1963. – Vol. 20, No. 2. – P. 130–141.
7. Fowler, A. *Chaos: An Introduction for Applied Mathematicians* / A. Fowler, M. McGuinness. – Berlin: Springer Cham. 2020. P. 43-206.
8. Henon, M. *A two-dimensional mapping with a strange attractor* / M. Henon // *Communications in Mathematical Physics*. – Berlin. Издательство: Springer Publisher, 1976. – Vol. 50, No. 1.– P. 69 –77.

9. Ovsyannikov, I. I. On the Birth of Discrete Lorenz Attractors Under Bifurcations of 3D Maps with Nontransversal Heteroclinic Cycles / I. I. Ovsyannikov // Regular Chaotic Dynamic. 2022. – Vol. 27, No. 1. – P. 217–231.
10. Denisova, N. V. On the Dynamics of Systems with Two Degrees of Freedom / N. V. Denisova // Dokl. Math, 2022. – Vol. 105. – P. 1–5.
11. Feigenbaum, M. J. The universal metric properties of nonlinear transformations / M. J. Feigenbaum // J. Stat. Phys. – Bristol: Institute of Physics Publishing, 1979. – Vol. 21, No. 6. – P. 669 – 706.
12. Loomis, S. P. Topology, convergence, and reconstruction of predictive states / P. S. Loomis, J P. Crutchfield // Journal of Physica. D, Nonlinear Phenomena. Publisher: Elsevier. – 2023. – Vol. 445. – URL: <https://csc.ucdavis.edu/~cmg/papers/gartsp.pdf> . (дата обращения: 19.09.2021)
13. Rowe, D. E. On the Background to Hilbert’s Paris Lecture “Mathematical Problems” / D. E. Rowe // A Richer Picture of Mathematics. Издательство: Springer. – 2018. – P. 183–194.
14. Kalman, R. E. Physical and Mathematical mechanisms of instability in nonlinear automatic control systems / R. E. Kalman // Transactions of ASME, Издательство: American Society of Mechanical Engineers Publisher, – 1957. – Vol. 79. – No. 3. – P. 553–566.
15. Kuznetsov, N. V. Theory of Hidden Oscillations and Stability of Control Systems / Kuznetsov N. V // Journal of Computer and Systems Sciences International. – 2020. – Vol 59. – P. 647 – 668.
16. Leonov, G. A. Effective methods for periodic oscillations search in dynamical systems / G. A. Leonov // App. math. & mech. Издательство: Scimago Publisher. – 2010. – Vol. 74. – No. 1. – P. 24–50.

17. Kuznetsov, N. V. Analytical-numerical method for attractor localization of generalized Chua's system / N. V. Kuznetsov, G. A. Leonov., V. I. Vagaitsev // IFAC Proceedings Volumes, Laxenburg, Издательство: IFAC Publisher. – 2010. – Vol. 43. – No. 11. – P. 29 – 33.
18. Kuznetsov, N. V. Experimental observation of hidden Chua's attractor / N. V. Kuznetsov, Ning Wang, Dan Xu, Han Bao, Mo Chen, Quan Xu. // Chaos, Solitons & Fractals Journal, Publisher: Pergamon. – 2023 – Vol 170. – URL: <https://doi.org/10.1016/j.chaos.2023.113427> . (дата обращения: 01.03.2023).
19. Kuznetsov, N. V. Localization of hidden Chua's attractors / N. V. Kuznetsov, G. A. Leonov., V. I. Vagaitsev // Physics Letters A. Издательство: Elsevier. – 2011. – Vol. 375. – No. 23. – P. 2230 – 2233.
20. Kuznetsov, N.V. Hidden attractors in Chua circuit: mathematical theory meets physical experiments / N.V. Kuznetsov, T. N. Mokaev, V. I. Ponomarenko, E. P. Seleznev, N.V. Stankevich, L. Chua // Nonlinear Dynamics Journal. Publisher: Springer Netherlands. – 2023. – Vol. 111. – P. 5859–5887.
21. Работнов, Ю. Н. Ползучесть элементов конструкций / Ю. Н. Работнов – М.: Наука, 1966. – 752 С.
22. Локощенко, А. М. Ползучесть и длительная прочность металлов при нестационарных сложных напряженных состояниях (обзор) / А. М. Локощенко, Л. В. Фомин, В. В. Терауд, Ю. Г. Басалов, В. С. Агабабян // Вестник Самарского государственного технического университета. Серия: Физико-математические науки – 2020. – Том 24, – № 2. – С. 275-318.
23. Тимошенко, С. П. Теория упругости / С. П. Тимошенко, Дж. Гудьер. – М.: Наука, 1975. – 576 С.

24. Лазарев, Н. П. Трёхмерная задача типа синьорини для композитных тел, контактирующих острыми гранями жёстких включений / Е. Д. Федотов, Н. П. Лазарев // Челябинский физико-математический журнал. – 2022. – Том 7, – вып 2. – С. 412–423.
25. Шалашилин, В. И. Метод продолжения решения по параметру и наилучшая параметризация / В. И. Шалашилин, Е. Б. Кузнецов. – М.: Эдиториал УРСС, 1999. – 224 С.
26. Семенов, А. А. Метод непрерывного продолжения решения по наилучшему параметру при расчете оболочечных конструкций / А. А. Семенов, С. С. Леонов // Ученые записки Казанского университета. Серия Физико-математические науки. – 2019. – Том. 161, №. 2. – С. 230-249.
27. Синай, Я. Г. Теория фазовых переходов. Строгие результаты / Я. Г. Синай. – Главная редакция физико-математической литературы, –М.: Наука, 1980. – 208 С.
28. Мухин, Р. Р. Из истории теории динамических систем: проблема классификации / Р. Р. Мухин // Известия высших учебных заведений. Прикладная нелинейная динамика. – 2019. – Том 27. – Выпуск 5. – С. 95-112.
29. Чернавский, Д. С. Синергетика и информация. Динамическая теория информации / Д. С. Чернавский. Серия: Синергетика: от прошлого к будущему. – Москва: Либроком, 2016. – 302 С.
30. Щукин, Е. Р. Движение нагреваемых внутренними источниками тепла гетерогенно горящих частиц в полях градиентов температуры и концентрации / Е. Р. Щукин, Ю. И. Яламов, В. М. Горбунов, Б. Г. Красовитов // Теплообмен и физическая газодинамика. – 1991. – Том. 29. – № 2. – С. 303-307.

31. Loyalka, S. K. Computation of Fission Product Condensation on Chainlike Aerosols and Agglomerates - II: Role of Energy and Mass Dependence of Molecules / S. K. Loyalka, N. E. White, R. V. Tompson // Nuclear Science and Engineering. – 2021. – Vol. 195. – Issue 2. – P.137–147.
32. Теплофизика: неравновесные процессы тепломассопереноса / В. И. Байков, Н. В. Павлюкевич, А. К. Федотов, А. И. Шнип ; Вышэйшая школа. – Минск: 2018. – 476 С.
33. Малышев, В. Л. Теоретический расчет газовых потоков в процессе изотермического парообразования многокомпонентных жидкостей в узких каналах различных сечений / В. Л. Малышев, Л. А. Уварова, А. С // Фельдблум Теплофизика высоких температур. – 1985. – Том. 23. – Выпуск. 2. – С. 331–335.
34. Уварова, Л. А. Энтропия и информация в р-адическом поле / Л. А. Уварова, Пхью Вэй Лин // сборник научных трудов МК0-2019 / Л. А. Уварова. – Пуццино, 2019. – С. 69.
35. Пхью Вэй Лин. Исследование на основе динамических систем р-адического анализа / Пхью Вэй Лин, Л. А. Уварова // сборник научных трудов МК0-2020 / Пхью Вэй Лин. – Дубна. – 2020. – С. 152.
36. Мушников, Н. В. Магнетизм и магнитные фазовые переходы: учебное пособие / Н. В. Мушников – Екатеринбург: Издательство: Уралский университета, 2017. – 168 С.
37. Мушников, Н. В. Магнитная нейтронография квазидвумерных магнетиков / Н. В. Мушников, А. И. Курбаков, А. Н. Коршунов, А. Н. Пирогов, Е. Г. Герасимов // Кристаллография. – 2021. – № 2. – Vol. 66. – С. 271–286.

38. Mikhamedov, F. Phase transition and chaos: P-adic Potts model on a Cayley tree / F. Mikhamedov, O. Khakimov // *Chaos. Solitons and Fractals*. – 2016. – № 87, P. 190–196.
39. Mikhamedov, F. A dynamical system approach to phase transitions p-adic Potts model on Cayley tree of order two / F. Mikhamedov // *Rep. Math. Phys.* – 2012. – № 70. – P. 385–406.
40. Ландау, Л. Д. Теоретическая физика, Физическая кинетика / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский ; – Москва : Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1979. – Том. X. – 528 С.
41. Nadykto, A. B. Preface (2013): *Mathematical Models of Non-linear Phenomena, Processes and Systems from Molecular Scale to Planetary Atmosphere* / A. B. Nadykto, L. A. Uvarova, A. V. Latyshev. – New York: Nova Science, 2013. – P. xi – xvii.
42. Nadykto, A. B. *Mathematical models of non-linear phenomena, processes and systems: From molecular scale to planetary atmosphere* / A. B. Nadykto, L. A. Uvarova, A. V. Latyshev; – New York: Nova Science. 2013. – 479 P.
43. Nadykto, A. B. Vaporization and growth of aerosol particles, given internal heat release and radiant heat exchange. In *Mathematical Models of Non-linear Excitations, Dynamics, Transfer and Control in Condensed Systems and Other Media* / A. B. Nadykto, E. R. Schukin and L. A. Uvarova // *Kluwer Academic Journal. Plenum*. – 1999. – P. 321-334.
44. Четверушкин, Б. Н. Законы сохранения и компактная квазигазодинамическая система / Б. Н. Четверушкин, А. Е. Луцкий, В. П. Осипов // *Математическое моделирование*. – 2019, – Том 31. – №12. – С. 21-32.
45. Черчиньяни, К. Теория и приложения уравнения Больцмана / К. Черчиньяни. – М.: Мир, 1978. – 496 С.

46. Wolfgang, E. Interfacial Mass Transfer During Gas–Liquid Phase Change in Deformable Porous Media with Heat Transfer / E. Wolfgang, K. Häberle // *Transport in Porous Media*, – 2016. – Vol. 114. – P. 525–556.
47. Marica, P. Numerical Modeling of Liquid-Vapor-Gas Flows with Arbitrary-Rate Mass Transfer / P. Marica // *Hyperbolic Problems: Theory, Numerics, Applications*. – 2022. – Vol II. – P. 185–194.
48. Antonov, D. V. Mathematical simulation of the heat and mass transfer in the movement of liquid droplets in a gas medium under the conditions of their intense phase transformations / D. V. Antonov, G. V. Kuznetsov, P. A. Strizhak // *Journal of Engineering Physics and Thermophysics*. – 2020. – Vol 93. – P. 1055–1076.
49. Pakhomov, M. A. The effect of droplets thermophysical properties on turbulent heat transfer in a swirling separated mist flow / M. A. Pakhomov, V. I. Terekhov // *International Journal of Thermal Sciences*. – 2020. – Vol.149. – P. 106-124.
50. Федорук, М. П. Вычислительная физика: учебное пособие для вузов / М. П. Федорук. – М.: Издательство Юрайт, 2024. – 333 С.
51. Loyalka, S. K. Isothermal condensation on a spherical particle / S. K. Loyalka, S. A. Hamidi, R. V. Tompson // *Phys. Fluids A*. – NewYork: Издательство: AIP Publishing, 1989. – Vo.1, – № 2. – P. 358-362.
52. Маргилевский, А. Е. О кинетической теории испарения аэрозольной частицы / А. Е. Маргилевский, В. Г. Черняк // *Изв. АН СССР. Сер. ТВТ*. – 1989. – Том. 27. № 4. – С. 751-757.
53. Лэм, Дж. Л. Введение в теорию солитонов / Дж. Л. Лэм : Пер. с англ. – М.: Мир, 1983. – 294 С.

54. Klaus, R. L. Cross-diffusion waves resulting from multiscale, multiphysics instabilities: application to earthquakes / R. L. Klaus // *Solid Earth*. – 2021. – Vol. 12. – Issue. 8. – P. 1829-2021.
55. Гнедовец, А. Г. Кинетика тепло- и массообмена при испарении и конденсационном росте капли в собственном паре / А. Г. Гнедовец // *Физико-химические процессы обработки материалов концентрированными потоками энергии*. – М.: Наука. – 1989. – С. 66-78.
56. Рязанов, В. В. Применение метода производящего функционала к исследованию уравнения состояния и явлений испарения и нуклеации / В. В. Рязанов // Автореф. дис. кан. физ.-мат. наук. Киев. 1979. 21 С.
57. Дерягин Б. В. Теория движения умеренно крупных аэрозольных частиц в неоднородных газах / Б. В. Дерягин, Ю. И. Яломов, В. С. Галоян // *Докл. АН СССР*. 1971. Т. 201. с. 383-385.
58. Ферцигер, Дж. Математическая теория процессов переноса в газах / Дж. Ферцигер, Г. Капер // Пер. с англ. – М.: Мир, 1976. – 554 С.
59. Kotaro, O. Mean-field kinetic theory analysis of vapor flow between evaporating and condensing interfaces in the presence of non-condensable gas molecules / O. Kotaro, K. Kobayashi, H. Fujii, M. Watanabe // *Physics of Fluids*. – 2021. – Vol. 33. Issue. – 12. URL: <https://doi.org/10.1063/5.0073118> (дата обращения: 22.12.2021).
60. Яломов, Ю. И. Вычисление скорости теплового скольжения газа вдоль сферической поверхности и её влияние на скорость термофореза / Ю. И. Яломов, О. А. Барсеган, А. А. Ющканов // *Физика аэродисперсных систем и физическая кинетика*. Калинин. КГУ. – 1975. С. 11-36.

61. Wei, S. Temperature jumps and Knudsen layer in rarefied molecular gas / S. Wei, Q. Li, Y. Zhang, L. Wu // *Physics of Fluids*. – 2022. – Vol 34, – Issue 3. – URL: <https://doi.org/10.1063/5.0086076> (Дата обращения: 17.3.2022).
62. Li, L. Measurements of the thermophoretic force on submicrometer particles in gas mixtures / L. Li, S. K. Loyalka, T. Tamadate, D. Sapkota, H. Ouyang, J. Christopher Jr. Hogan // *Journal of Aerosol Science*. – 2024. – Vol. 178. – URL: <https://doi.org/10.1016/j.jaerosci.2024.106337> (Дата обращения: 1.4.2024).
63. Гапонов, А. В. Солитоны в действии / А. В. Гапонов, А. В. Грехов : Перев с англ. – Москва : Мир, 1981. – 312 С.
64. Гупало, Ю. Н. О массо- и теплообмене сферической частицы в ламинарном потоке вязкой жидкости / Ю. Н. Гупало, Ю. С. Рязанцев // *Прикл. мат. и мех.* Издательство: AIP Publishing. – 1971. – Том. 35. – С. 255-265.
65. Полянин, А. Д. Тепломассоперенос к реагирующей частице в потоке газа в случае произвольной зависимости коэффициента переноса от температуры / А. Д. Полянин, Ю. С. Рязанцев // *Изв. АН СССР. Сер. мжг.* – 1984. – №1. – С. 111-119.
66. Balachandar, S. Dispersed multiphase heat and mass transfer / S. Balachandar, E. E. Michaelides // *Annual Review of Heat Transfer*. – 2021. – Vol. 24. – P.173-215.
67. Гупало, Ю. Н. Массо-теплообмен реагирующих частиц с потоком / Ю. Н. Гупало, А. Д. Полянин, Ю. С. Рязанцев. – М.: Наука, 1985. – 336 С.
68. Головин, А. М. Нестационарный конвективный массоперенос внутри капли при наличии объемной химической реакции / А. М. Головин, А. Ф. Животягин // *Прикл. матем. и мех.* – 1983. – Том. 47. – № 5. – С. 771-780.
69. Левич, В. Г. Физико-химическая гидродинамика / В. Г. Левич. – М.: Физматгиз, 1959. – 699 С.

70. Jyoti, P. Flow and thermal field in sessile droplet evaporation at various environmental conditions / P. Jyoti, S. S Basant, K. A. Basant // Heat transfer. – 2021. – Vol. 50, – Issue. 5. – P. 4535-4551.
71. Шифрин, К. С. Кинетика испарения капли в радиационном поле / К. С. Шифрин, Ж. К. Золотова // Изв. АН СССР. Сер. ФАО. – 1966. – Том. 2. – С. 1311–1315.
72. Hu, L. Thermal Radiation / L. Hu, M. Delichatsios // Encyclopedia of Wildfires and Wildland-Urban Interface (WUI) Fires. – 2020. – P. 1004–1011.
73. Яламов, Ю. И. В диффузионном испарении капель в поле электромагнитного излучения при произвольных перепадах температуры / Ю. И. Яламов, Е. Р. Шукин, В. Б. Кутуков, В. Л. Малышев // Изв. АН СССР. Сер. ТВТ. – 1977. – Том. 15. – С. 434-436.
74. Пришивалко, А. П. Оптические и тепловые поля внутри светорассеивающих частиц / А. П. Пришивалко –Миск.: Наука и техника, 1983. 190 С.
75. Avila, SR. G. Fragmentation of acoustically levitating droplets by laser-induced cavitation bubbles / SR. G. Avila, C. D. Ohl // Journal of Fluid Mechanics. – 2016. – Vol. 805. – P. 551 – 576.
76. Зуев, В. Е. Нелинейные оптические эффекты в аэрозолях / В. Е. Зуев, Ю. Д. Копытин, А. В. Кузиковский –Новосибирск.: Наука, 1980. – 184 С.
77. Зуев, В. Е. Мощное лазерное излучение в атмосферном аэрозоле / В. Е. Зуев, А. А. Землянов, Ю. Д. Копытин, А. В. Кузиковский –М.: Наука. 1984. 223 с.
78. Волович, В. И. Р-адическая математическая физика: основные конструкции, применения к сложным и наноскопическим системы / И. В. Волович, С. В. Кузырев // Самара: СГУ. – 2008. – 30 с.

79. Самохин, А. А. Возмущение поверхности раздела при фазовых переходах под действием интенсивного монохроматического излучения / А. А. Самохин. Перпринт. – М.: ФИАН, 1984. – № 34. – 16 с.
80. Гогосов, В. В. Гидродинамика поверхностных явлений / В. В. Гогосов, В. А. Начетова, Н. Г. Тактаров, Чыонг За Бинь, Г. А. Шапошникова // Прикл. матем. и мех. – 1984. – Том. 48, – № 3. – С. 388–396.
81. Куни, Ф. М. Проблемы кинетики конденсации / Ф. М. Куни // Препринт. – Киев.: ИТФ АН УССР, 1983. – № ИТФ-83-79. – 26 С.
82. Гринин, А. П. Влияние флуктуаций концентрации раствора в зародышах на скорость двухкомпонентной нуклеации / А. П. Гринин, Ф. М. Куни, Ю. Ш. Джинаев // Вест. ЛГУ. Сер. Физика, химия. – 1989. – Вып 2. – С. 80-83.
83. Cai. The proper view of cluster free energy in nucleation theories/ Cai, Runlong, Kangasluoma, Juha // Aerosol Science and Technology. – 2022. – Vol. 56, – No. 8. – P. 757-766.
84. Загайнов, В. А. Роль физико-химических процессов в формировании и переносе высокодисперсных аэрозолей: Автореф. дис-та. физ. -мат. наук : 02.00.04 / Загайнов Валерий Анатольевич ; НИФХИ – Москва, 2011. – 20 С.
85. Kazakov, A. Multi-component evaporation modeling under microgravity conditions / A. Kazakov, F. L. Dryer // Combustion and Flame. – 2021. – Vol. 233, – P. 133-144.
86. Седунов, Ю. С. Физика образования жидкокапельной фазы в атмосфере / Ю. С. Седунов – Ленинград.: Гидрометеиздат, 1972. – 207 С.
87. Головин, А. М. Испарение капли раствора в высокотемпературной среде / А. М. Головин, В. П. Песочин // Изв. АН СССР. Сер. ТВТ. – 1976. – Том. 14. – С. 814–822.

88. Li, X. Water, Salt, Organics, and Minerals: Improved Understanding of Aerosol Microphysics from a Nanoscale Basis: Dissertation in candidacy for the degree of Doctor of Philosophy / X. Li ; supervisor. I. C. Bourg ; Princeon University – Princeton, 2023. – P. 4–16.
89. Глушков, В. Е. Кинетика испарения капель бинарных растворов / В. Е. Глушков : дисс. канд. физ. мат. наук. / Глушков, В. Е ; Одесский государственный университете. – Одесса, – 1968. – 177 с.
90. Данилов, В. В. Испарение капель бинарных растворов / В. В. Данилов Дисс. канд. физ. мат. наук. – Ленинград, – 1967. – 156 с.
91. Finneran, J. Deviations from classical droplet evaporation theory / J. Finneran, C. P. Garner, F. Nadal // Proceeding of royal society A. – 2021. – Vol. 477, – Issue. 2251. – URL: <https://royalsocietypublishing.org/doi/10.1098/rspa.2021.0078> (дата обращения: 21 06. 2021).
92. Sergei, S. S. Heating and Evaporation of Multi-component Droplets / S. S. Sergei // Droplets and Sprays: Simple Models of Complex Processes. – 2022. P. 175–275.
93. Белоцкий, Е. Д. Низкочастотные взаимопревращения структуры капель в постоянном электрическом поле / Е. Д. Белоцкий, А. В. Ковальчук, О. Д. Лаврентович, Б. И. Лев, В. В. Серган // Журн. exper. И теор. физ. – 1989. – Том. 95. – № 5. – С. 350-364.
94. Фельдблюм, А. С. Испарение бинарных жидких смесей из капилляров в различных температурных режимах: дисс. канд. физ. матнаук : 01.04.14 / Александр Семенович Фельдблюм ; нау. рук. Н. И. Гамаюнов ; Калинин политехн ин-т. – Калинин, 1984. – 139 С.
95. Хейфец, Л. И. Многофазные процессы в пористых средах / Л. И. Хейфец, А. В. Неймарк. – Москва : Химия, 1982. – 319 С.

96. Малышев, В. Л. Исследование особенностей испарения влаги из капилляров при высоких температурах : дисс. канд. физ-мат. наук. : 01.04.15 / Владимир Львович Малышев ; Калинин политехн ин-т. – Калинин, 1980. – 141 С.
97. Гамаюнов, Н. И. Испарение жидкостей из капилляров переменного сечения в неоднородном температурном поле / Н. И. Гамаюнов, А. А. Ланков // High Temperature. – 1985. С. 781–786 ; – Том. 23(4) – С. 629–633.
98. Черняк, В. Г. Движение бинарной газовой смеси в цилиндрическом канале / В. Г. Черняк // ЖПМТФ. – 1982. – № 1. – С. 34–40.
99. Жданов, В. М. Неизотермическое течение газовой смеси в канале при промежуточных числах Кнудсена / В. М. Жданов, В. А. Зазноба // Прикл. матем. и мех. – 1981. – Том. 45. – № 6. – С. 1063-1072.
100. Чермянинов, И. В. Процессы тепло- и массопереноса многоатомного газа в плоском канале при произвольных числах Кнудсена / И. В. Чермянинов, В. Г. Черняк, Г. А. Фомягин // Журнал прикл. матем. и техн. физ. – 1984. – № 9. – С. 81–90.
101. Плетнев, Л. В. Машинное моделирование процесса испарения воды из капилляра / Л. В. Плетнев // Расчетные методы в физической химии. – 1983. – С. 75-78.
102. Астанова, В. И. Расчет кинетики испарения неидеальных трехкомпонентных смесей / В. И. Астанова, В. С. Бобрович // Процессы тепло-массопереноса в энергетических установках. – Минск : ИТМО АН СССР. – 1989. – С. 21-25.
103. Анисимов, С. И. Физическая кинетика и процессы переноса при фазовых превращениях / С. И. Анисимов – Минск : Наука и техника, 1980. – 208 С.

104. Дерягин, Б. В. Поверхностные силы / Б. В. Дерягин, Н. В. Чураев, В. М. Муллер ; – Москва : Наука, 1985. – 395 С.
105. Роулинсон, Дж. Молекулярная теория капиллярности / Дж. Роулинсон, Б. Уидом. Пер. с англ. – Москва : Мир, 1986. – 376 С.
106. Qian, Y. Capillary condensation under atomic-scale confinement / Y. Qian, P. Z. Sun, L. Fumagalli, Y. V. Stebunov, S. J. Haigh, Z. W. Zhou, I. V. Grigorieva, F. C. Wang, A. K. Geim // Nature 588. – 2020. – P. 250 – 253.
107. Маковский, Н. Н. Эффекты изменения свойств жидкостей в ограниченных объемах : автореф. к-та канд. физ. -мат. наук : 01.04.02 / Николай Николаевич Маковский ; – Киев. 1982. – 21 С.
108. Жданов, В. М. Баро- и термодиффузия газовой смеси в капилляре / В. М. Жданов // Журн. прикл. матем. и техн. физ. – 1982. – № 2. – С. 48-51.
109. Сергеев, Г. Т. Тепломассообмен пористых сред при пористом вдуве / Сергеев Г. Т ; Наука и техника – Минск: Наука и техника, 1981. – 127 С.
110. Чураев, Н. В. Влияние поверхностных сил на течение жидкости в тонких порах / Н. В. Чураев // Инж. физ. журн. – 1984. – Том. 45. – № 1. – С. 154-163.
111. Левданский, В. В. Об индуцированном резонансным лазерным излучением течении разреженного газа в капиллярно-пористых телах / В. В. Левданский, О. Г. Мартыненко Препринт. – Минск : ИТМО АН БССР. – 1984. – № 9. – 27 С.
112. Старов, В. М. К теории капиллярной пропитки волокнистых материалов / В. М. Старов, Н. В. Чураев // Колл. журн. – 1982. – Том. 44. – № 2. – С. 271.
113. Углов, А. А. Нагрев пористых материалов импульсным лазерным излучением / А. А. Углов, И. Ю. Смуров, В. А. Гребенчиков // Физико-химические

процессы обработки материалов концентрированными потоками энергии. – Москва: Наука. – 1989. – С. 66-78.

114. Калуцков, О. А. Моделирование динамики мезо- и нанообъектов в электромагнитном поле: дис. канд. физ.-мат. наук : 1.2.2 / Олег Александрович Калуцков ; науч. рук. Л. А. Уварова ; МГТУ(СТАНКИН), – Москва, 2022. – 156 с.

115. Пуанкаре, А. Избранные труды в трех томах / А. Пуанкаре ; Наука – Москва : Наука, 1975. – Том. 3. – 769 с.

116. Диканский, А.С. Уравнения диффузии с нелинейной кинетикой / А.С. Диканский. – Пушино: НИВЦ АН СССР, 1979. – Деп. В ВИНТИ № 1405-80. – 89 С.

117. Курант, Р. Уравнение с частными производными / Р. Курант ; Пер. с англ. – Москва : Мир, 1964. – 830 с.

118. Ладыженская, О. А. Линейные и квазилинейные уравнения эллиптического типа / О. А. Ладыженская, Н. Н. Уральцева. – Москва : Наука, 1973. – 576 с.

119. Ладыженская, О. А., Уральцева Н. Н. О разрешимости первой краевой задачи для квазилинейных эллиптических и параболических уравнений при наличии особенностей / О. А. Ладыженская, Н. Н. Уральцева // Докл. АН СССР. – Москва, 1985. – Том. 281. – № 2. – С. 275-279.

120. Atanu, C. An Overview of Emergent Order in Far-from-Equilibrium Driven Systems: From Kuramoto Oscillators to Rayleigh–Bénard Convection / C. Atanu, M. Nicholas, Y. Yash, G. S. Iannacchione // Entropy. – 2020. – Vol. 22. – Issue 5. URL: <https://doi.org/10.3390/e22050561> (дата обращения: 1.4.2024).

121. Mrinal, S. Kuramoto model with additional nearest-neighbor interactions: Existence of a nonequilibrium tricritical point / S Mrinal, S. Gupta // Physical Review E

journal. – 2020. URL: <https://doi.org/10.1103/physreve.102.032202> (Дата обращения: 2.9.2020).

122. Коздова, Л. А. Решения нелинейных задач теплопроводности / Л. А. Коздова. – Киев : Наукова думка, 1976. – 135 с.

123. Колесников, П. М. Методы теории переноса в нелинейных средах / П. М. Колесников – Минск : Наука и техника, 1981. – 336 с.

124. Бицадзе, А. В. К построению точных решений некоторых классов нелинейных уравнений, описывающих нестационарные процессы / А. В. Бицадзе // Актуальные проблемы математической физики и вычислительной математики. – Москва : Наука. – 1984. – С. 34-40.

125. Похожаев, С. И. Об одной задаче Л. В. Овсянникова / С. И. Похожаев // Журн. прикл. матем. и техн. физ. – 1989. – № 2. – С. 5-10.

126. Бицадзе, А. В. Некоторые классы уравнений в частных производных / А. В. Бицадзе – Москва : Наука, 1981. – 448 с.

127. Kumagai, K. Bifurcation diagrams for semilinear elliptic equations with singular weights in two dimensions / K. Kumagai // Analysis of Partial Differential Equations. – 2024. – P. 476–494.

128. Visintin, A. Γ -compactness and Γ -stability of the flow of heat-conducting fluids / A. Visintin // Discrete and Continuous Dynamical Systems-S. – 2022. – Vol. 15. – P. 2331–2343.

129. Jeanjean, L. Nonlinear scalar field equations with general nonlinearity / L. Jeanjean, L. Sheng-Sen. // Nonlinear Analysis. – 2020. – Vol. 190. – P. 1–30.

130. Вольперт А. И. О пространственно неоднородных решениях нелинейных диффузионных уравнений / А. И. Вольперт, А. Н. Иванова: Препринт. Черногловка. ИТФ. 1981. 33 с.
131. Галактионов, В. А. О методе стационарных состояний для нелинейных эволюционных параболических задач / В. А. Галактионов, С. П. Курдюмов, А. А. Самарский // Докл. АН СССР. – 1984. – Том. 278. – С. 1296–1300.
132. Бункин, Ф. В. Об одной нелинейной задаче лазерной термохимии / Ф. В. Бункин, В. А. Галактионов, И. А. Кериченко, С. П. Курдюмов, А. А. Самарский, Докл. АН СССР. – 1984. – Том. 279. – С. 838–842.
133. Похожаев, С. И. Об априорных оценках решений квазилинейных эллиптических уравнений произвольного порядка / С. И. Похожаев // Диф. ур. – 1983. – Том. 19. – № 1. – С. 101-110.
134. Капель, Я. И. Существование решения типа бегущей волны для системы уравнений Белоусова-Жаботинского/ Я. И. Капель // Диф. ур. – 1990. – Том. 26. – № 4. – С. 652–660.
135. Абловиц, М. Солитоны и метод обратной задачи: пер. с англ./ М. Абловиц, Х. Сигур. – Москва : Мир, 1987. – 479 С.
136. Zhou, Y. Stability analysis on dark solitons in quasi-1D Bose–Einstein condensate with three-body interactions / Y. Zhou, H. Meng, J. Zhang et al. // Sci Rep 11. – 2021. – URL: <https://doi.org/10.1038/s41598-021-90814-2> .
137. Тахтаджян, Л. А. Гамильтоновы подходы в теории солитонов / Л. А. Тахтаджян, Л. Д. Фаддеев. – Москва: Наука, 1986. – 528 с.

138. Shoyeb, A. S. Basis Function Approaches for Numerical Solutions of Nonlinear Partial Differential Equations / A. S. Shoyeb // *Mathematical Statistician and Engineering Applications*. – 2024. – Vol. 71(4). – P. 13467–13483.
139. Абловиц, М. Солитоны и методы обратной задачи / М. Абловиц, Х. Сигур. Пер с англ. – Москва : Мир, 1987. – 480 с.
140. Захаров, В. Е. Теория солитонов / В. Е. Захаров, С. В. Манаков, С. П. Новиков, Л. П. Питаевский – Москва : Наука, 1980. – 320 с.
141. Li, G. Long-time asymptotic behavior for the nonlocal nonlinear Schrödinger equation in the solitonic region / G. Li, Y. Yang, E. Fan // *Sci. China Math.* – 2024. – Vol. 67. – Issue 10. – URL: <https://doi.org/10.1007/s11425-023-2240-2> (дата обращения: 29.8.2024).
142. Zhang, Q. Existence and asymptotics of normalized solutions for the logarithmic Schrödinger system / Q. Zhang, W. Zou // *Sci. China Math.* – 2024. – Vol. 67. – P. 2019–2048.
143. Mingyu, M. Rational Solutions for Two Nonautonomous Lattice Korteweg–de Vries Type Equations / M. Mingyu, Z. Songlin, W. Feng // *Symmetry*. Publisher: MDPI. – 2024. – Vol. 16. – Issue 8. – URL: <https://doi.org/10.3390/sym16081037> (дата обращения: 25.7.2024).
144. Маломед, Б. А. Эволюция бессолитонных волновых пакетов в нелинейном уравнении Шредингера и уравнении Кортевега–де Вриза с диссипативными возмущениями / Б. А. Маломед // *Теор. матем. физ.* – 1986. – Том.69. – № 1. – С. 175–188.
145. Kaw, P. K. Nonlinear laser–plasma interactions / P. K. Kaw // *Rev. Mod. Plasma Phys.* – 2017. – Vol. 1. – P. 1–42.

146. Fotopoulos, G. Extreme wave events for a nonlinear Schrödinger equation with linear damping and Gaussian driving / G. Fotopoulos, D. J. Frantzeskakis, N. I. Karachalios // *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*. – 2020. – Vol. 82. – P. 58-64.
147. Gromov, E. M. Solitons in a forced nonlinear Schrödinger equation with the pseudo-Raman effect / E. M. Gromov, B. A. Malomed // *Nonlinear Sciences*. – 2015. – Vol. 92. – Issue. 6. – P. 1–13.
148. Wang, X. New solitons and breather-like solutions to a (2+1)-dimensional coupled variable-coefficient Schrödinger equation in optical fibers / X. Wang, B. Gao // *Nonlinear Dynamics* – 2024. – Vol.112. – P. 17321–17343.
149. Билярин, М. А. О локальной разрешимости нелинейного уравнения Шредингера с переменными коэффициентами / М. А. Билярин // *Вестник ЛГУ сер. физика, химия*. – 1989. – № 2. – С. 80-83.
150. Бурцев, С. П. Метод обратной задачи с переменным спектральным параметром / С. П. Бурцев, В. Е. Захаров, А. В. Михайлов // *Теор. мат. физ.* – 1987. – Том. 70. – № 3. – С. 323-341.
151. Gerdjikov, V. S. Nonlinear evolution equations related to Kac-Moody algebras $A_r^{(1)}$ spectral aspects / V. S. Gerdjikov // *Turkish Journal of Mathematics*. – 2022. – Vol. 46. – No.5. – P. 1828-1844.
152. Лурье, А. И. Теория упругости / Лурье А. И. – Москва : Наука, 1970. – 939 с.
153. Groza, A. Nonlinear surface polaritons near the interface between a magneto-optical substance and a nonlinear metamaterial with a permittivity close to zero / A. Groza, N. Siddelev // *Scientific Herald of Uzhhorod University. Series: Physics*. – 2022. – Issue. 51. - P. 24–29.

154. Михалаке, Д. Р-поляризованные нелинейные поверхностные связанные волны в слоистых структурах / Михалаке Д., В. К. Федянин // Теор. мат. физ. – 1983. – Том. 54. – С. 443–455.
155. Mihalache, D. P-polarized nonlinear surface waves in symmetric layered structures / D. Mihalache, R. G. Nazmitdinov, V. K. Fedyanin // Physica Scripta. – 1984. – Vol. 29, – P. 269-275.
156. Hussein, A. J. Dispersion properties of slab waveguides with a linear graded-index film and a nonlinear substrate / A. J. Hussein, Z. M. Nassar, S. A. Taya. // Microsystem Technologies. – 2021. – Vol. 27. – P. 2589–2594.
157. Михалаке, Д. Сильно нелинейные S-поляризованные поверхностные поляритоны в симметричных слоистых структурах / Д. Михалаке, В.К. Федянин // Препринт. – Дубна : ОИЯИ, 1983. – № 17-83-36. – 8 С.
158. Калуцков, О. А. Моделирование динамики мезо- и нанообъектов в электромагнитном поле : автореф. дис. ... канд. физ. -мат. наук : 1.2.2 / Олег Александрович Калуцков ; МГТУ(Станкин). – Москва, 2022. – 24 с.
159. Shuonan, W. Solution landscape of reaction-diffusion systems reveals a nonlinear mechanism and spatial robustness of pattern formation / W. Shuonan, Y. Bing, T. Yuhai, L. Zhang // physics.bio.ph. – 2024. – URL: <https://doi.org/10.48550/arXiv.2408.10095> (дата обращения: 19.08.2024).
160. Mercker, M. Beyond Turing: mechanochemical pattern formation in biological tissues / M. Mercker, F. Brinkmann, A Marciniak-Czochra // Biol Direct. – Vol.11. – 2016. – URL: <https://doi.org/10.1186/s13062-016-0124-7> (Дата обращения: 04.05.2016).
161. Hao, W. Spatial pattern formation in reaction–diffusion models: a computational approach / W. Hao, C. Xue // J. Math. Biol. – 2020. – Vol. 80. – P. 521–543.

162. Egaña F. G. “Strong” Turing-Hopf Instability for Reaction-Diffusion Systems / G. F. Egaña, J. S. González, M. R. Ricard // Analysis and Partial Differential Equations: Perspectives from Developing Countries. – 2019. – Vol. 275. – P. 137–158.
163. Zhimin, L. Spatio-temporal dynamics of some reaction-diffusion population models in heterogeneous environments: Doctoral (PhD) thesis / Li Zhimin. – Newfoundland, 2024. – P. 40–69.
164. Zafar, A. Towards Industrially Important Applications of Enhanced Organic Reactions by Microfluidic Systems / A. Zafar // Molecules. – 2024. – Vol. 29(2). – P. 1–25.
165. Adib, M. Application of Chaos Theory in Different Fields - A Literature Review / M. Adib, N. H. Adenan, N. S. A. Karim, T. S. Wei, Z. Zhaofeng // Journal of Science and Mathematics Letters. – 2024. – Vol. 12. – Issue 1. – P. 92–101.
166. Strogatz, S. H. Nonlinear Dynamics and Chaos: With Applications to Physics, Biology, Chemistry, And Engineering / S. H. Strogatz // – Boca Raton: CRC Press. 2018. – 532 p.
167. Борн, М. Основы оптики / М. Борн, Э. Вольф. – Москва : Наука, 1973. – 720 с.
168. Уварова, Л. А. p -адический анализ динамической системы и явление энтропии / Л. А. Уварова, П. В. Лин // Инновации и инвестиции. – 2020. – №.3. – С. 229–231.
169. Хренников, А. Ю. Моделирование процессов мышления в p -адических системах координат / А. Ю. Хренников. – Москва : Физматлит, 2004. – 296 с.
170. Пхью Вэй Лин. p -адическая динамическая система и её приложения / Пхью Вэй Лин, Л. А. Уварова // Сборник тезисов 4-ой международной научной

конференции «Моделирование нелинейных процессов и систем», Москва. 1517 октября 2019 г. – С. 160-161.

171. Владимиров, В. С. Р-адический анализ и математическая физика / В. С. Владимиров, И. В. Волович, Е.И. Зеленов. – Москва : Физматлит, 1994. – 352 с.

172. Волович, И. В. Р-адическая математическая физика: основные конструкции, применение к сложным наноскопическим системам / И. В. Волович, С. В. Козырев. – Самара : Самарский гос. ун-т, 2009. – 30 с.

173. Khrennikov, A. Yu. On the concept of random sequence with respect to p-adic valued probabilities / A. Yu. Khrennikov, Sh. Yamada. // Theory of Probability and Its Applications Journal. – 2005. – Vol. 49. – P. 65–76.

174. Khrennikov, A. Yu. An algorithmic approach to p-adic probability theory / A. Yu. Khrennikov // Theory of Probability and Its Applications Journal, – 1994. – Vol. 39. – P. 139–141.

175. Зеленов, Е. И. Некоторые вопросы р-адической математической физики Автореферат : дисс. доктора физико–математических наук : 01.01.03 / Евгений Игоревич Зеленов. – Москва.: Математический институт им. В. А. Стеклова РАН, 2018. – 23 с.

176. Volovich, I. V. Number Theory as Ultimate Theory of Physic / I.V. Volovich // P-adic Numbers, Ultrametric analysis and applications, – 2010, – Vol. 2. – P.77-87.

177. Тарасевич, Ю. Ю. Перколяция: теория, приложения, алгоритмы : учебное пособие / Ю. Ю. Тарасевич. – Москва : Едиториал УРСС, 2002. – 112 с.

178. Уварова, Л. А. Моделирование фазовых переходов на основе Р-адического анализа и дерева Кэлли / Л. А. Уварова, Пхью Вэй Лин // Инновации и инвестиции. - 2020. - № 7. - С. 137-142.

179. Mansuripur, M. A Tutorial on the Classical Theories of Electromagnetic Scattering and Diffraction / M. Mansuripur // *Nanophotonics*. – 2021. – Vol. 10. – No. 1. – P. 315–342.
180. Skarka, V. Linear modulational stability analysis of Ginzburg – Landau dissipative vortices / V. Skarka, N. Aleksić, W. Krolikowski, D. Christodoulides, B. Aleksić, M. Belić // *Opt. Quant. Electron.* – 2016. – Vol. 48. – No. 4. 240 p.
181. Aleksić, B. N. Stability and nesting of dissipative vortex solitons with high vorticity / B. N. Aleksić, V. Skarka, M. Belić // *Phys. Rev. A*. – 2015. – Vol. 91. – No. 4. – URL : <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.91.043832> .
182. Skarka, V. Self-structuring of stable dissipative breathing vortex solitons in a colloidal nanosuspension / V. Skarka, N. B. Aleksić, W. Krolikowski, D. Christodoulides, S. Rakotoarimalala, B. N. Aleksić, M. Belić // *Optics Express*. – 2017. – Vol. 25. – No. 9. – P. 1090–1102.
183. Половников, В. Ю. Влияние радиационного теплообмена на интенсификацию теплопереноса в тонкопленочной тепловой изоляции / В. Ю. Половников // *Известия Томского политехнического университета. Серия: инжиниринг георесурсов*. – 2020. – Том. 331. – №. 8. - С. 34-39.
184. Ильина, Е. А. Моделирование фазовых превращений и сверхупругого упрочнения нестабильных материалов / Е. А. Ильина, Л. А. Сараев // *Вестн. Сам. гос. техн. ун-та. Серия: Физ.-мат.науки*. – 2018. – Том. 22. – № 3. – С. 407–429.
185. Drin, Y. About the approximate solutions to linear and non-linear pseudodifferential reaction diffusion equations / Y. Drin, Y. Ushenko, I. Drin, S. Drin // *Mohyla Math. J.* – 2019. – Vol. 2. – P. 41–45.
186. Kuttler, C. Reaction-diffusion equations with applications: Lecture Notes / C Kuttler. – Munich : Munich Technical University, 2011. – 91 с.

187. Уварова, Л. А. Некоторые точные решения для вектора напряженности электрического поля в сопряженных нелинейных средах / Л. А. Уварова. – Дубна : ОИЯИ, Препринт. № Р 17-87-693, 1987. – 14 с.
188. Уварова, Л. А. Моделирование процесса переноса “реакция – диффузия” в нелинейном электромагнитном поле / Л. А. Уварова, Пхью Вэй Лин // Вестник Самарского государственного технического университета. Серия: Физико-математические науки. – 2021. – Том 25. – №. 4. – С. 663–675.
189. Uvarova, L. A. Modeling of the “Reaction – Diffusion” Transfer Process in the Nonlinear Electromagnetic Field / L. A. Uvarova, Phyo Wai Linn // Journal of Numerical Analysis, Industrial and Applied Mathematics, 2022. - Vol. 2425. Issue.1. AIP Conf. Proc. 2425, 100003. URL:10.1063/5.0081638.
190. Uvarova, L. A. Peculiarities of stochastic resonance in disperse systems / L. A. Uvarova, I. V. Krivenko, A. F. Ivannikov // Australian Institute of Physics 17th National Conference 2006: Refereed Papers (3-8 December, 2006; Brisbane, Australia). – Canberra, 2006. – С. 274.
191. Uvarova, L. A. The movement of molecules and nanoparticles in potential field with the Casimir force in nano volumes with different optical boundaries / L. A. Uvarova, S. S. Babarin // Physica Scripta. – 2014. – No. T162, 014053. – URL : 10.1088/0031-8949/2014/T162/014053.
192. Буренок, Я. С. Математическое моделирование взаимодействия электромагнитной волны с металлическими мезо- и наночастицами : автореф. дис. ... канд. физ.-мат. наук : 05.13.18 / Яна Сергеевна Буренок ; МГТУ(СТАНКИН) – Москва, 2017. – 24 с.
193. Уварова, Л. А, Рассеяние электромагнитной волны на сферической частице с нелинейными свойствами / Л. А. Уварова, В. К. Федянин. – Дубна: ОИЯИ, Препринт. № Р 17-89-372, 1989. – 7 с.

194. Лахно, В. Д. Влияние электронного разогрева белков на скорость электронного транспорта / В. Д. Лахно, Л. А. Уварова. – Пушкино : Препринт. Пушкинский научный центр РАН. – 1993. – 13 с.
195. Чикова, О. А. О структурных переходах в сложнолегированных сплавах / Чикова О. А. // Известия высших учебных заведений. Черная металлургия. – 2020. – Том. 63. – № 3-4. – С. 261–270.
196. Dong, S. H. The overlap integral of three associated Legendre Polynomials / S. H. Dong, R. Lemus // Applied Mathematics Letters. – 2002. – No. 15. – P. 541-546.
197. Krivenko, I. V. Two disperse particles in the field of the electromagnetic radiation / I. V. Krivenko, A. V. Klinger, L. A. Uvarova // Mathematical Modeling: Problems, Methods, Applications. – Boston, 2001. – P. 231–243.
198. Малые поглощающие частицы в электромагнитном поле и теплоперенос в дисперсных системах / Л. А. Уварова, И. В. Кривенко, М. А. Смирнова, А. Ф. Иванников ; МГТУ(СТАНКИН) – Москва : Янус–К, 2014. – 192 с.
199. Гельфанд, И. М. Представления группы вращений и группы Лоренца, их применение / И. М. Гельфанд, Р. А. Минлос, З. Я. Шапиро. – Москва : Наука, 1958. – 368 с.
200. Уварова, Л. А. Электромагнитный резонанс и индуцированные эффекты в дисперсных системах / Л. А. Уварова, Пхью Вэй Лин, И. В. Кривенко // Журнал «Перспективы науки», Тамбов. – 2023. – № 10(169), – С. 35–50. – ISSN 2077–6810.
201. Дерягин, Б. В. Теория диффузиофореза больших аэрозольных частиц / Б. В. Дерягин, Ю.И. Яламов // ДАН СССР, 1965. – Том. 165. – № 2. – С. 364-367.
202. Бёрд, Г. Молекулярная газовая динамика / Г. Бёрд – Москва : Мир, 1981. – 320 с.

203. Пхью Вэй Лин. Исследование на основе динамических систем p -адического анализа / Пхью Вэй Лин, Л. А. Уварова // Сборник тезисов 27-ой международной конференции «Математика, компьютер, образования», Дубна. 27 января -1 февраля 2020 г. - С. 152.
204. Уварова, Л. А. Дискретно-континуальное моделирование фазовых переходов с использованием графов / Л. А. Уварова, Пхью Вэй Лин // Материалы конференции 6-ой международной научной конференции «Моделирование нелинейных процессов и систем», Москва. 2023 г. – С. 307.
205. Уварова, Л. А. Моделирование фазового перехода первого рода через наноструктуру на поверхности раздела / Л. А. Уварова, Пхью Вэй Лин, А. В. Соколов // Материалы конференции международной конференции «Самарские чтения (в память об академике А. А. Самарском)», Москва. 2022. – С. 236.
206. Кудряшов, Н. А. Аналитическая теория нелинейных дифференциальных уравнений / Н. А. Кудряшов // – Ижевск : Изд-во институт компьютерных исследований, 2019. – 360 с. – ISBN 5-93972-285-7.
207. Каплан, Г. И. Межмолекулярные. взаимодействия. Физическая интерпретация, компьютерные расчёты и модельные потенциалы. / Г. И. Каплан. Лаборатория знаний – Москва : Бином, 2014. – 394 с. – ISBN 978-5-94774-939.
208. Крокстон, К. Физика жидкого состояния. статистическое введение / К. Крокстон. –Москва : Мир, 1978. – 400 с.
209. Френкель, Я. И. Кинетическая теория жидкостей / Я.И. Френкель. – Ленинград : Наука. 1975. – 424 с.
210. Хренников, А. Ю. p -адическая теория вероятностей и её приложения. Принцип статистической стабилизации частот / А. Ю. Хренникова // Теоретическая и математическая физика. – 1993. – Том. 97, – № 3. – С. 348-363.

211. Зеленов, Е. И. Некоторые вопросы p -адической математической физики : дисс. доктор физико–математических наук : 01.01.03 / Евгений Игоревич Зеленов ; Математический институт им. В. А. Стеклова РАН. – Москва, 2018. – 145 с.
212. Phyoo Wai Linn. Modification of the percolation algorithm by considering the liquid-gas phase transition / Phyoo Wai Linn // Материалы конференции 7-ой международной научной конференции «Моделирование нелинейных процессов и систем», Москва. 2024. – С. 30.
213. Avetisov, V. A. p -adic models of ultrametric diffusion constrained by hierarchical energy landscapes / V. A. Avetisov, A. H. Bikulov, S. V. Kozyrev, V. A. Osipov // Journal of Physics A: Mathematical and General. – 2002. – Vol. 35. – No. 2. – P. 177–189.

ПРИЛОЖЕНИЯ

Приложение А. Некоторые примеры гамильтониана

1. **Однмерные цепи Маркова:** Пусть Ω –пространство выборок конечной цепи Маркова с r состояниями. Пространство диапазона Φ состоит из r элементов, а P является мерой на Ω со стационарной матрицей перехода $\Pi = \|\pi_{ij}\|$ и со стационарным распределением $\pi = \{\pi_1, \dots, \pi_r\}$ все $\pi_{ij} > 0$. Для $V = (k, k + 1, \dots, k + m)$,вероятность конфигурации $\varphi(V) = (\varphi(k), \varphi(k + 1), \dots, \varphi(k + m))$ равна

$$\begin{aligned} & \pi_{\varphi(k)} \cdot \pi_{\varphi(k)\varphi(k+1)} \cdot \pi_{\varphi(k+1)\varphi(k+2)} \cdot \dots \cdot \pi_{\varphi(k+m)\varphi(k+m)} \\ & = \exp \left\{ \ln \pi_{\varphi(k)} + \sum_{i=k}^{k+m-1} \ln \pi_{\varphi(i)\varphi(i+1)} \right\} \end{aligned}$$

Тогда $H(\varphi) = - \sum_{i=-\infty}^{i=\infty} \ln \pi_{\varphi(i)\varphi(i+1)}$, энергии взаимодействия $\xi(\varphi(V))$ равен нулю за исключением $V = (i, i + 1)$.

2. **d –мерная модель Изинга:** Пусть пространство диапазона Φ состоит из 2 точек: $\Phi = \{-1, 1\}$. $\xi(\varphi(V))$ равно нулю, за исключением $V = (x, y), \|x - y\| = 1$, В этом случае $\xi(\varphi(V)) = \xi \varphi(x)\varphi(y)$, т. е.

$$H = J \sum_{(x,y):\|x-y\|=1} \varphi(x)\varphi(y)$$

Если $J > 0$, называется ферромагнитной моделью. Если $J < 0$, то называется антиферромагнитная модель. Id – идентичность преобразования. S – симметрия преобразования, h – внешнее поле. Модель Изинга для внешнего поля является

$$H = J \sum_{(x,y):\|x-y\|=1} \varphi(x)\varphi(y) + h \sum_{x \in Z^d} \varphi(x)$$

3. **X,Y-модель:** Пусть $d = 2$ и Φ -поверхность S^1 единичной окружности $-\pi < \varphi \leq \pi$.

$$H = \sum_{(x,y):\|x-y\|=1} \varphi(x)\varphi(y)$$

4. **Классический ротатор:** Пусть $d \geq 1$ и Φ – поверхность m – мерной сферы: $\Phi = S^{n-1}$. Гамильтониан

$$H = J \sum_{\|x-y\|=1} \varphi(x)\varphi(y)$$

5. **Решетчатое поле Янга-Миллса:** $d \geq 2$, упорядоченная пара: $l = (x, y)$, x – начальная точка, y – конечная точка связи. Упорядоченная пара (y, x) будет $-l$. $\varphi(-l) = \varphi^{-1}(l)$.

$$H = \sum Tr(\varphi(x_1, x_2)\varphi(x_2, x_3)\varphi(x_3, x_4)\varphi(x_4, x_1))$$

Где (x_1, x_2, x_3, x_4) 4 – кортеж вершин и $x_1 \rightarrow x_2 \rightarrow x_3 \rightarrow x_4$.

6. Пусть гамильтониан H , и для каждого V на пространстве конфигураций $\varphi(V)$ определена мера, являющаяся прямым произведением меры χ на пространстве Φ . Для любого конечного множества V рассмотрим такую конфигурацию $\varphi(Z^d - V)$, что $H(\varphi(V)|\varphi(Z^d - V))$ конечно для любой конфигурации $\varphi(V)$ и интеграл

$$\Theta = \int \exp\{-H(\varphi(V)) - H(\varphi(V)|\varphi(Z^d - V))\} \times \prod_{s \in V} d\chi(\varphi(s))$$

интеграл называется статической суммой.

Приложение Б. Таблица интегралов K_{10} , K_{1n} и K_{2n} для параграф (3.2) модель теплопереноса

n	K_{10}	K_{1n}	K_{2n}
0	0.0049	0.1786	0
1	0.0049	-0.0135	0.0589
2	0.0049	-0.0137	-0.0459
3	0.0049	-0.0088	0.0283
4	0.0049	-0.0049	-0.0226
5	0.0049	-0.0040	0.0174
6	0.0049	-0.0024	-0.0150
7	0.0049	-0.0018	0.0125
8	0.0049	-8.5502×10^{-4}	-0.0113
9	0.0049	-3.7901×10^{-4}	0.0097

Приложение В. MATLAB коды для модификации расчётов по тепло-и массопереносу

```

% Dissertation version
I_0=0.05; % Низкоуровневый лазер(Гелий-Неоновый лазер) Недорогой, непрерывный, видимый, 50
mW or 0.05 watt
lambda=633*10^(-9);% длина волны лазера 633 nm (красный)
Ti=0; % начальное время
omega=2*pi; % Угловая частота 2pi/Ti
c=299792458; % Скорость света
% k=(2*pi)/lambda; % волновое число
k=1;
epsilon_10=3.23;% Диэлектрическая проницаемость аланина
epsilon_20=15;% Диэлектрическая проницаемость MBVA
epsilon_0=1; % диэлектрическая проницаемость вакуума 1 or 8.854*10^-12 Farad meter
sigma_1=0.13;% Проводимость аланина
sigma_2=0.2;% Проводимость MBVA
delT1=22;% оригинальное тепловое воздействие лазера на белок
delT2=25;% оригинальное тепловое воздействие лазера на MBVA
mass1=1.01*10^(-21);% масса 1 нм аланина
mass2=742.86*10^(-17);% масса 10 нм MBVA
m_1=(0.5*(epsilon_10+(epsilon_10^2+(16*pi^2*sigma_1^2)/omega^2)^(0.5)))^(0.5); % m_1=m'_1
m_2=(2*pi*sigma_1)/(omega*m_1); % m_2=m''1
m1=m_1+sqrt(-1)*m_2;% j=sqrt(-1)
E_0=1; %let 1
alpha=linspace(0.0001,0.1,10); % нелинейность
alpha1=linspace(0.0001,0.001,10); % нелинейность малого размера 10%
alpha2=linspace(0.001,0.1,10);% нелинейность большого размера 90%
% alpha=linspace(1,1000,10); % нелинейность
% alpha1=linspace(1,100,10); % нелинейность малого размера 10%
% alpha2=linspace(100,1000,10);% нелинейность большого размера 90%
q=(m_1.*m_2.*I_0.*k)./(sqrt(epsilon_10.*abs(E_0).^2)).*((epsilon_10./alpha1).^2+((16.*pi.^2.*sigma_1.^2)./(
(omega.^2.*abs(alpha1).^2))).^(1./2)); % плотности теплового потока для внутренней области
figure(1)
tiledlayout(2,2);
nexttile
plot(alpha1,q,'-b',LineWidth=2);
xlabel('Нелинейность \alpha_1',FontSize=20);
ylabel('Плотность теплового потока(q)',FontSize=20);
title('Плотность теплового потока зависимости \newline от параметра нелинейности
\alpha_1', 'fontsize',25);
nexttile
plot(alpha2,q,'-r',LineWidth=2);
xlabel('Нелинейность \alpha_2',FontSize=20);
ylabel('Плотность теплового потока (q)',FontSize=20);
title('Плотность теплового потока зависимости \newline от параметра нелинейности
\alpha_2', 'fontsize',25);
nexttile([1 2]);
plot(alpha,q,'k',LineWidth=2);
xlabel('Нелинейность \alpha',FontSize=20);
ylabel('Плотность теплового потока (q)',FontSize=20);
title('Плотность теплового потока зависимости от параметра нелинейности \alpha', 'fontsize',25);

```

```

figure(2)
tiledlayout(2,2);
nexttile
plot(alpha1,q,'-b',LineWidth=2);
xlabel('Нелинейность 1-ой области',FontSize=20);
ylabel('Энергия от Лазера',FontSize=20);
title('Поглощённая энергия в 1-й области','fontsize',25);
legend('Поглощённая энергия')
nexttile
plot(alpha2,q,'r',LineWidth=2);
xlabel('Нелинейность 2-ой область',FontSize=20);
ylabel('Энергия от Лазера',FontSize=20);
title('Поглощённая энергия в 2-й области','fontsize',25);
legend('Поглощённая энергия')
nexttile([1 2]);
plot(alpha1,q,'b',alpha2,q,'r',LineWidth=2);
xlabel('Нелинейность \alpha',FontSize=25);
ylabel('Энергия от Лазера',FontSize=25);
title('Поглощённая энергия зависимости от параметра нелинейности','fontsize',30);
legend('Поглощённая энергия в 1-й области','Поглощённая энергия в 2-й области',FontSize=20);
x1=linspace(0,5,10);% x для 1-й области(inner)
x2=linspace(0,10,10);% x для 2-й области. При более длительном времени температура зависит от x,
а не от времени.(outter)
X=linspace(0,10,10); % Размер модели
figure(3)
tiledlayout(2,2);
nexttile
plot(x1,q,'-b',LineWidth=2);
xlabel('Размер 1-ой области',FontSize=20);
ylabel('Энергия от Лазера',FontSize=20);
title('Поглощённая энергия в 1-й области','fontsize',25);
legend('Поглощённая энергия')
nexttile
plot(x2,q,'r',LineWidth=2);
xlabel('Размер 2-ой области',FontSize=20);
ylabel('Энергия от Лазера',FontSize=20);
title('Поглощённая энергия в 2-й области','fontsize',25);
legend('Поглощённая энергия')
nexttile([1 2]);
plot(x1,q,'-b',x2,q,'-r',LineWidth=2);
xlabel('Модель',FontSize=25);
ylabel('Энергия от Лазера',FontSize=25);
title('Поглощённая энергия от размера частицы','fontsize',30);
legend('Поглощённая энергия в 1-й области','Поглощённая энергия в 2-й области',FontSize=20);
C1_p=1.26; % Теплоемкость белка (аланина)
C2_p=1.4; % Теплоемкость Ж/К (МВВА)
rho1=1.027; % Плотность аланина
rho2=1.42; % Плотность МВВА
chi1=0.2; % Коэффициент теплопроводности аланина
chi2=0.34; % Коэффициент теплопроводности МВВА
chi=chi1/chi2;
r=0.1; % Радиус любой точки. Пусть r = 0.
R1=0.5; % Радиус внутренней области;0.5 nm
R2=5; % Радиус внешней области;5 nm
x=r/R1;
d=10.4;% d=R2/R1

```

```

n=linspace(0,9,10);
aa=(pi.*n)/d;% y_n
bb=(pi.^2.*n.^2)./d.^2;
cc=cot((pi.*n)/d);
dd=sin((pi.*n)/d).^2;
ee=1-aa.*cc;
ee(isnan(ee)) = 0;% Replace NaN with 0
ff=(pi.^2.*n.^2)/(d.^2.*dd);%1
ff(isnan(ff)) = 0;% Replace NaN with 0
gg=(9.4.*pi.^2.*n.^2)/(d.^2.*sin(9.4.*(pi.*n)/d).^2);%2
gg(isnan(gg)) = 0;% Replace NaN with 0
phi_n=ee.*(ff+gg);
hh=sin((9.4.*pi.*n)/10.4).^2;
ii=sqrt(hh);%3
jj=(sin((pi.*n)/20).*phi_n)/bb;%4
jj(isnan(jj)) = 0;% Replace NaN with 0
kk=jj./ii;%5
kk(isnan(kk)) = 0;% Replace NaN with 0
tau=[0.01 0.1 1 10 30 60 120 300 600 1200]; % время тестирования(s)
psi_n=1-exp(-(pi.^2.*n.^2)/(d.^2).*tau); % all tau
psi_n1=1-exp(-(pi.^2.*n.^2)/(d.^2).*0.01);% tau=0.01
psi_n2=1-exp(-(pi.^2.*n.^2)/(d.^2).*0.1);% tau=0.1
psi_n3=1-exp(-(pi.^2.*n.^2)/(d.^2).*1);% tau=1
psi_n4=1-exp(-(pi.^2.*n.^2)/(d.^2).*10);% tau=10
psi_n5=1-exp(-(pi.^2.*n.^2)/(d.^2).*30);
psi_n6=1-exp(-(pi.^2.*n.^2)/(d.^2).*60);
psi_n7=1-exp(-(pi.^2.*n.^2)/(d.^2).*120);
psi_n8=1-exp(-(pi.^2.*n.^2)/(d.^2).*300);
psi_n9=1-exp(-(pi.^2.*n.^2)/(d.^2).*600);
psi_n10=1-exp(-(pi.^2.*n.^2)/(d.^2).*1200);
ll=kk.*psi_n1;
sum_of_tau1=sum(ll);
mm=kk.*psi_n2;
sum_of_tau2=sum(mm);
nn=kk.*psi_n3;
sum_of_tau3=sum(nn);
oo=kk.*psi_n4;
sum_of_tau4=sum(oo);
pp=kk.*psi_n5;
sum_of_tau5=sum(pp);
qq=kk.*psi_n6;
sum_of_tau6=sum(qq);
rr=kk.*psi_n7;
sum_of_tau7=sum(rr);
ss=kk.*psi_n8;
sum_of_tau8=sum(ss);
tt=kk.*psi_n9;
sum_of_tau9=sum(tt);
uu=kk.*psi_n10;
sum_of_tau10=sum(uu);
ww=kk.*psi_n;
sum_of_tau=sum(ww);
sum_of_all_tau=sum(sum_of_tau1+sum_of_tau2+sum_of_tau3+sum_of_tau4+sum_of_tau5+sum_of_tau6
+sum_of_tau7+sum_of_tau8+sum_of_tau9+sum_of_tau10);
b=((chi*C1_p*rho1)/(C2_p*rho2))^1/2;
t_chi=(C2_p.*rho2.*R1.^2)./chi2;%

```

```

absE=epsilon_0./abs(alpha);
q_bar=(4.*pi.*m_1.*m_2.*I_0.*absE.^2)./(C1_p.*(absE.^2)-1);
T1_0=293; % Начальная температура аланина
T2_0=296; % Начальная температура MBVA
T11=T1_0+((2.*chi*q_bar.*R1.*t_chi)./(C1_p.*rho1.*r)).*sum_of_tau1;
T12=T1_0+(2.*chi*q_bar.*R1.*t_chi)./(C1_p.*rho1.*r).*sum_of_tau2;
T13=T1_0+(2.*chi*q_bar.*R1.*t_chi)./(C1_p.*rho1.*r).*sum_of_tau3;
T14=T1_0+(2.*chi*q_bar.*R1.*t_chi)./(C1_p.*rho1.*r).*sum_of_tau4;
T15=T1_0+(2.*chi*q_bar.*R1.*t_chi)./(C1_p.*rho1.*r).*sum_of_tau5;
T16=T1_0+(2.*chi*q_bar.*R1.*t_chi)./(C1_p.*rho1.*r).*sum_of_tau6;
T17=T1_0+(2.*chi*q_bar.*R1.*t_chi)./(C1_p.*rho1.*r).*sum_of_tau7;
T18=T1_0+(2.*chi*q_bar.*R1.*t_chi)./(C1_p.*rho1.*r).*sum_of_tau8;
T19=T1_0+(2.*chi*q_bar.*R1.*t_chi)./(C1_p.*rho1.*r).*sum_of_tau9;
T110=T1_0+(2.*chi*q_bar.*R1.*t_chi)./(C1_p.*rho1.*r).*sum_of_tau10;
T1=T1_0+(2.*chi*q_bar.*R1.*t_chi)./(C1_p.*rho1.*r).*sum_of_tau;
%T1=T1_0+(2.*chi*q_bar.*R1.*t_chi)./(C1_p.*rho1.*r).*0.01; % for best picture
% Tau=[0.01 0.1 1 10 60 600 900 1800 3600 7200];
% T11=T1_0+(2.*q_bar.*R1.*t_chi)./(C1_p.*rho1.*r).*0.00001;
% T12=T1_0+(2.*q_bar.*R1.*t_chi)./(C1_p.*rho1.*r).*0.001;
% T13=T1_0+(2.*q_bar.*R1.*t_chi)./(C1_p.*rho1.*r).*0.01;
% T14=T1_0+(2.*q_bar.*R1.*t_chi)./(C1_p.*rho1.*r).*0.1;
% T15=T1_0+(2.*q_bar.*R1.*t_chi)./(C1_p.*rho1.*r).*0.5;
% T16=T1_0+(2.*q_bar.*R1.*t_chi)./(C1_p.*rho1.*r).*1;
% T17=T1_0+(2.*q_bar.*R1.*t_chi)./(C1_p.*rho1.*r).*2;
% T18=T1_0+(2.*q_bar.*R1.*t_chi)./(C1_p.*rho1.*r).*3;
% T19=T1_0+(2.*q_bar.*R1.*t_chi)./(C1_p.*rho1.*r).*4;
% T110=T1_0+(2.*q_bar.*R1.*t_chi)./(C1_p.*rho1.*r).*5;
ccc=aa.*(d-1);
ddd=sin(ccc);
eee=sin((pi.*n/d).*(d-3./2));
iii=sin((9.4.*pi.*n)/10.4).^2.*pi.^2.*n.^2;
fff=1-b.*aa.*cot(b.*aa);
fff(isnan(fff)) = 0;% Replace NaN with 0
psi_n21=1-exp(-(pi.^2.*n.^2)./(d.^2).*0.01);
psi_n22=1-exp(-(pi.^2.*n.^2)./(d.^2).*0.1);
psi_n23=1-exp(-(pi.^2.*n.^2)./(d.^2).*1);
psi_n24=1-exp(-(pi.^2.*n.^2)./(d.^2).*10);
psi_n25=1-exp(-(pi.^2.*n.^2)./(d.^2).*30);
psi_n26=1-exp(-(pi.^2.*n.^2)./(d.^2).*60);
psi_n27=1-exp(-(pi.^2.*n.^2)./(d.^2).*120);
psi_n28=1-exp(-(pi.^2.*n.^2)./(d.^2).*300);
psi_n29=1-exp(-(pi.^2.*n.^2)./(d.^2).*600);
psi_n210=1-exp(-(pi.^2.*n.^2)./(d.^2).*1200);
psi_n=1-exp(-(pi.^2.*n.^2)./(d.^2).*tau);
An=(sin((pi.*n)/d).*(d-3/2).*phi_n.*d.^2)./(sin((pi.*n)/d).*(d-1).*pi.^2.*n.^2);
An(isnan(An)) = 0;% Replace NaN with 0
A1=An.*psi_n21;
A2=An.*psi_n22;
A3=An.*psi_n23;
A4=An.*psi_n24;
A5=An.*psi_n25;
A6=An.*psi_n26;
A7=An.*psi_n27;
A8=An.*psi_n28;
A9=An.*psi_n29;
A10=An.*psi_n210;

```

```

sum_of_A1=sum(A1);
sum_of_A2=sum(A2);
sum_of_A3=sum(A3);
sum_of_A4=sum(A4);
sum_of_A5=sum(A5);
sum_of_A6=sum(A6);
sum_of_A7=sum(A7);
sum_of_A8=sum(A8);
sum_of_A9=sum(A9);
sum_of_A10=sum(A10);
sum_of_An=sum(An);
sum_of_all_An=sum_of_A1+sum_of_A2+sum_of_A3+sum_of_A4+sum_of_A5+sum_of_A6+sum_of_A7+s
um_of_A8+sum_of_A9+sum_of_A10;
%T2(tau)=(4.*q_bar.*R1.*t)/(C1_p.*rho1.*3).*sum_of_An
t=1;
T21=(2.*q_bar.*R1.*t)/(C1_p.*rho1.*r).*sum_of_A1;
T22=(2.*q_bar.*R1.*t)/(C1_p.*rho1.*r).*sum_of_A2;
T23=(2.*q_bar.*R1.*t)/(C1_p.*rho1.*r).*sum_of_A3;
T24=(2.*q_bar.*R1.*t)/(C1_p.*rho1.*r).*sum_of_A4;
T25=(2.*q_bar.*R1.*t)/(C1_p.*rho1.*r).*sum_of_A5;
T26=(2.*q_bar.*R1.*t)/(C1_p.*rho1.*r).*sum_of_A1;
T27=(2.*q_bar.*R1.*t)/(C1_p.*rho1.*r).*sum_of_A2;
T28=(2.*q_bar.*R1.*t)/(C1_p.*rho1.*r).*sum_of_A3;
T29=(2.*q_bar.*R1.*t)/(C1_p.*rho1.*r).*sum_of_A4;
T210=(2.*q_bar.*R1.*t)/(C1_p.*rho1.*r).*sum_of_A5;
T2=(2.*q_bar.*R1.*t)/(C1_p.*rho1.*r).*sum_of_An;
%T2=(4.*q_bar.*R1.*t)/(C1_p.*rho1.*3).*8.8;% for best picture
figure(4)
tiledlayout(2,2);
nexttile
plot(tau,T1,'-b',LineWidth=2);
xlabel('Время(\tau)',FontSize=20);
ylabel('Температура',FontSize=20);
title('Поглощённая температура в 1-й области','fontsize',25);
legend('Поглощённая температура T_1')
nexttile
plot(tau,T2,'r',LineWidth=2);
xlabel('Время(\tau)',FontSize=20);
ylabel('Температура',FontSize=20);
title('Поглощённая температура в 2-й области','fontsize',25);
legend('Поглощённая температура T_2')
nexttile([1 2]);
plot(tau,T1,'-b',tau,T2,'-r',LineWidth=2);
xlabel('Время(\tau)',FontSize=20);
ylabel('Температура',FontSize=20);
title('Температура частицы вследствие поглощённой энергии как функция времени','fontsize',25);
legend('Поглощённая температура в 1-й области','Поглощённая температура в 2-й области');
U1=154; % Энергия активации аланина
U2=30; % Энергия активации MBVA
Rg= 8.3145; % Молярная газовая постоянная
%sum_for_Tbar=sum(((pi.*n)./d.*phi_n.*tau)/((pi.^3.*n.^3).*b).*(1./((pi.*n./d).*b)-cot(pi.*n./d.*b)));
aaa=((pi.*n)./d.*phi_n.*tau)/((pi.^3.*n.^3).*b).*(1./((pi.*n./d).*b)-cot(pi.*n./d.*b));
aaa(isnan(aaa)) = 0;% Replace nan with 0
sum_for_Tbar=sum(aaa);
T1_bar=T1_0+(6.*psi_n.*q_bar.*t.*x)/(C1_p.*rho1).*sum_for_Tbar;
T1_bar1=T1_0+(6.*psi_n1.*q_bar.*t.*x)/(C1_p.*rho1).*sum_for_Tbar;

```

```

T1_bar2=T1_0+(6.*psi_n2.*q_bar.*t.*x)/(C1_p.*rho1).*sum_for_Tbar;
T1_bar3=T1_0+(6.*psi_n3.*q_bar.*t.*x)/(C1_p.*rho1).*sum_for_Tbar;
T1_bar4=T1_0+(6.*psi_n4.*q_bar.*t.*x)/(C1_p.*rho1).*sum_for_Tbar;
T1_bar5=T1_0+(6.*psi_n5.*q_bar.*t.*x)/(C1_p.*rho1).*sum_for_Tbar;
T1_bar6=T1_0+(6.*psi_n6.*q_bar.*t.*x)/(C1_p.*rho1).*sum_for_Tbar;
T1_bar7=T1_0+(6.*psi_n7.*q_bar.*t.*x)/(C1_p.*rho1).*sum_for_Tbar;
T1_bar8=T1_0+(6.*psi_n8.*q_bar.*t.*x)/(C1_p.*rho1).*sum_for_Tbar;
T1_bar9=T1_0+(6.*psi_n9.*q_bar.*t.*x)/(C1_p.*rho1).*sum_for_Tbar;
T1_bar10=T1_0+(6.*psi_n10.*q_bar.*t.*x)/(C1_p.*rho1).*sum_for_Tbar;
% Q=(6.*chi)/(C1_p.*rho1).*sum((phi_n)/(bb.*b.^2).*(1-aa.*b.*cot(aa.*b)));
bbbb=(phi_n)/(bb.*b.^2).*(1-aa.*b.*cot(aa.*b));
bbbb(isnan(bbbb)) = 0;% Replace nan with 0
Q=2.73.*sum(bbbb);
% J=(T1_0+q_bar.*Q.*t)/(2.3.*q_bar.*Q).*exp(-(U1)/(Rg.*(T1_0+q_bar.*Q.*t)))-
(T1_0)/(2.3*q_bar*Q).*exp(-
(U1)/(Rg.*T1_0))+U1/(Rg.*q_bar.*Q).*(log((T1_0)/(T1_0+q_bar.*Q.*t))+T1_0/(T1_0+q_bar.*Q.*t)+sum(-
1.^n./n.*n.*((U1)/(Rg.*(T1_0+q_bar.*Q.*t))).^n-(U1/(Rg.*T1_0)).^n));
dddd=(T1_0+q_bar.*Q.*t)/(2.3.*q_bar.*Q).*exp(-(U1)/(Rg.*(T1_0+q_bar.*Q.*t)))-
(T1_0)/(2.3*q_bar*Q).*exp(-
(U1)/(Rg.*T1_0))+U1/(Rg.*q_bar.*Q).*(log((T1_0)/(T1_0+q_bar.*Q.*t))+T1_0/(T1_0+q_bar.*Q.*t));
eeee=-1.^n./n.*n.*((U1)/(Rg.*(T1_0+q_bar.*Q.*t))).^n-(U1/(Rg.*T1_0)).^n);
eeee(isnan(eeee)) = 0;% Replace nan with 0
J=ddd+sum(eeee);
c_10=0.1;% Концентрация аланина
c_20=0.3;% Концентрация МВВА
c0_1=1; % Пусть 1
nu_0=1; % экспоненциальная постоянная из уравнения Аррениуса
c1_1=(c0_1.*(c_20-c0_1).*exp(-nu_0.*(c_20-c0_1)).*exp(-U1/(T1_bar.*Rg)))/(c_20.*c0_1.*exp(-
nu_0.*(c_20-c0_1).*exp(-U1/(T1_bar.*Rg))));
c1_1_300K=(c0_1.*(c_20-c0_1).*exp(-nu_0.*(c_20-c0_1)).*exp(-U1/(300.*Rg)))/(c_20.*c0_1.*exp(-
nu_0.*(c_20-c0_1).*exp(-U1/(300.*Rg))));% 25 C
c1_1_308K=(c0_1.*(c_20-c0_1).*exp(-nu_0.*(c_20-c0_1)).*exp(-U1/(308.*Rg)))/(c_20.*c0_1.*exp(-
nu_0.*(c_20-c0_1).*exp(-U1/(308.*Rg))));% 35 C
c1_1_318K=(c0_1.*(c_20-c0_1).*exp(-nu_0.*(c_20-c0_1)).*exp(-U1/(318.*Rg)))/(c_20.*c0_1.*exp(-
nu_0.*(c_20-c0_1).*exp(-U1/(318.*Rg))));% 45 C
c1_1_348K=(c0_1.*(c_20-c0_1).*exp(-nu_0.*(c_20-c0_1)).*exp(-U1/(348.*Rg)))/(c_20.*c0_1.*exp(-
nu_0.*(c_20-c0_1).*exp(-U1/(348.*Rg))));% 75 C
c1_1_373K=(c0_1.*(c_20-c0_1).*exp(-nu_0.*(c_20-c0_1)).*exp(-U1/(373.*Rg)))/(c_20.*c0_1.*exp(-
nu_0.*(c_20-c0_1).*exp(-U1/(373.*Rg))));% 100 C
gamma=2.71828; % Постоянная Эйлера
Bolzk=1.380*10^(-23); % Постоянная Больцмана
eta1=0.4; % Вязкость аланина
eta2=0.1361; % Вязкость МВВА
T=298; % комнатная температура 25 C
D=(k.*T)/(6.*pi.*eta2.*R2);% Коэффициент диффузии
T2_bar=T2_0+(6.*psi_n2.*q_bar.*t.*x)/(C2_p.*rho2).*sum_for_Tbar;
T2_bar1=T2_0+(6.*psi_n21.*q_bar.*t.*x)/(C2_p.*rho2).*sum_for_Tbar;
T2_bar2=T2_0+(6.*psi_n22.*q_bar.*t.*x)/(C2_p.*rho2).*sum_for_Tbar;
T2_bar3=T2_0+(6.*psi_n23.*q_bar.*t.*x)/(C2_p.*rho2).*sum_for_Tbar;
T2_bar4=T2_0+(6.*psi_n24.*q_bar.*t.*x)/(C2_p.*rho2).*sum_for_Tbar;
T2_bar5=T2_0+(6.*psi_n25.*q_bar.*t.*x)/(C2_p.*rho2).*sum_for_Tbar;
T2_bar6=T2_0+(6.*psi_n26.*q_bar.*t.*x)/(C2_p.*rho2).*sum_for_Tbar;
T2_bar7=T2_0+(6.*psi_n27.*q_bar.*t.*x)/(C2_p.*rho2).*sum_for_Tbar;
T2_bar8=T2_0+(6.*psi_n28.*q_bar.*t.*x)/(C2_p.*rho2).*sum_for_Tbar;
T2_bar9=T2_0+(6.*psi_n29.*q_bar.*t.*x)/(C2_p.*rho2).*sum_for_Tbar;
T2_bar10=T2_0+(6.*psi_n210.*q_bar.*t.*x)/(C2_p.*rho2).*sum_for_Tbar;

```

```

xi=D.*T2_bar;
mu_0=0.863;
kappa=1/d;
M1=c_10*cos((mu_0*kappa)/(1-kappa));
M2=c0_1*kappa*cos((mu_0*kappa)/(1-kappa)^3);
fun=@(x)x./sin(mu_0.*(1-kappa).*x);
fun2=@(x)(1-x).^2./sin(mu_0.*(1-kappa).*x);
K_10=M1.*integral(fun,kappa,1)-M2.*integral(fun,kappa,1);
fun3=@(x)(x.*cos(pi.*0.*x))./sin(mu_0.*(1-kappa).*x);
fun4=@(x)(x.*(1-x).^2.*cos(pi.*0.*x))./sin(mu_0.*(1-kappa).*x);
K_1n_0=2.*M1.*integral(fun3,kappa,1)-2.*M2.*integral(fun4,kappa,1);
fun77=@(x)(x.*cos(pi.*2.*x))./sin(mu_0.*(1-kappa).*x);
fun88=@(x)(x.*(1-x).^2.*cos(pi.*2.*x))./sin(mu_0.*(1-kappa).*x);
K_1n_1=2.*M1.*integral(fun77,kappa,1)-2.*M2.*integral(fun88,kappa,1);
fun7=@(x)(x.*cos(pi.*2.*x))./sin(mu_0.*(1-kappa).*x);
fun8=@(x)(x.*(1-x).^2.*cos(pi.*2.*x))./sin(mu_0.*(1-kappa).*x);
K_1n_2=2.*M1.*integral(fun7,0.1,1)-2.*M2.*integral(fun8,0.1,1);
fun9=@(x)(x.*cos(pi.*3.*x))./sin(mu_0.*(1-kappa).*x);
fun10=@(x)(x.*(1-x).^2.*cos(pi.*3.*x))./sin(mu_0.*(1-kappa).*x);
K_1n_3=2.*M1.*integral(fun9,kappa,1)-2.*M2.*integral(fun10,kappa,1);
fun11=@(x)(x.*cos(pi.*4.*x))./sin(mu_0.*(1-kappa).*x);
fun12=@(x)(x.*(1-x).^2.*cos(pi.*4.*x))./sin(mu_0.*(1-kappa).*x);
K_1n_4=2.*M1.*integral(fun11,kappa,1)-2.*M2.*integral(fun12,kappa,1);
fun13=@(x)(x.*cos(pi.*5.*x))./sin(mu_0.*(1-kappa).*x);
fun14=@(x)(x.*(1-x).^2.*cos(pi.*5.*x))./sin(mu_0.*(1-kappa).*x);
K_1n_5=2.*M1.*integral(fun13,kappa,1)-2.*M2.*integral(fun14,kappa,1);
fun15=@(x)(x.*cos(pi.*6.*x))./sin(mu_0.*(1-kappa).*x);
fun16=@(x)(x.*(1-x).^2.*cos(pi.*6.*x))./sin(mu_0.*(1-kappa).*x);
K_1n_6=2.*M1.*integral(fun15,kappa,1)-2.*M2.*integral(fun16,kappa,1);
fun17=@(x)(x.*cos(pi.*7.*x))./sin(mu_0.*(1-kappa).*x);
fun18=@(x)(x.*(1-x).^2.*cos(pi.*7.*x))./sin(mu_0.*(1-kappa).*x);
K_1n_7=2.*M1.*integral(fun17,kappa,1)-2.*M2.*integral(fun18,kappa,1);
fun19=@(x)(x.*cos(pi.*8.*x))./sin(mu_0.*(1-kappa).*x);
fun20=@(x)(x.*(1-x).^2.*cos(pi.*8.*x))./sin(mu_0.*(1-kappa).*x);
K_1n_8=2.*M1.*integral(fun19,kappa,1)-2.*M2.*integral(fun20,kappa,1);
fun21=@(x)(x.*cos(pi.*9.*x))./sin(mu_0.*(1-kappa).*x);
fun22=@(x)(x.*(1-x).^2.*cos(pi.*9.*x))./sin(mu_0.*(1-kappa).*x);
K_1n_9=2.*M1.*integral(fun21,kappa,1)-2.*M2.*integral(fun22,kappa,1);
fun23=@(x)(x.*cos(pi.*10.*x))./sin(mu_0.*(1-kappa).*x);
fun24=@(x)(x.*(1-x).^2.*cos(pi.*10.*x))./sin(mu_0.*(1-kappa).*x);
K_1n_10=2.*M1.*integral(fun23,kappa,1)-2.*M2.*integral(fun24,kappa,1);
fun2_1=@(x)(x.*sin(pi.*0.*x))./cos(mu_0.*(1-kappa).*x);
fun2_2=@(x)(x.*(1-x).^2.*sin(pi.*0.*x))./cos(mu_0.*(1-kappa).*x);
K_2n_0=2.*M1.*integral(fun2_1,kappa,1)-2.*M2.*integral(fun2_2,kappa,1);
fun2_3=@(x)(x.*sin(pi.*1.*x))./cos(mu_0.*(1-kappa).*x);
fun2_4=@(x)(x.*(1-x).^2.*sin(pi.*1.*x))./cos(mu_0.*(1-kappa).*x);
K_2n_1=2.*M1.*integral(fun2_3,kappa,1)-2.*M2.*integral(fun2_4,kappa,1);
fun2_5=@(x)(x.*sin(pi.*2.*x))./cos(mu_0.*(1-kappa).*x);
fun2_6=@(x)(x.*(1-x).^2.*sin(pi.*2.*x))./cos(mu_0.*(1-kappa).*x);
K_2n_2=2.*M1.*integral(fun2_5,kappa,1)-2.*M2.*integral(fun2_6,kappa,1);
fun2_7=@(x)(x.*sin(pi.*3.*x))./cos(mu_0.*(1-kappa).*x);
fun2_8=@(x)(x.*(1-x).^2.*sin(pi.*3.*x))./cos(mu_0.*(1-kappa).*x);
K_2n_3=2.*M1.*integral(fun2_7,kappa,1)-2.*M2.*integral(fun2_8,kappa,1);
fun2_9=@(x)(x.*sin(pi.*4.*x))./cos(mu_0.*(1-kappa).*x);
fun2_10=@(x)(x.*(1-x).^2.*sin(pi.*4.*x))./cos(mu_0.*(1-kappa).*x);
K_2n_4=2.*M1.*integral(fun2_9,kappa,1)-2.*M2.*integral(fun2_10,kappa,1);

```

```

fun2_11=@(x)(x.*sin(pi.*5.*x))./cos(mu_0.*(1-kappa).*x);
fun2_12=@(x)(x.*(1-x).^2.*sin(pi.*5.*x))./cos(mu_0.*(1-kappa).*x);
K_2n_5=2.*M1.*integral(fun2_11,kappa,1)-2.*M2.*integral(fun2_12,kappa,1);
fun2_13=@(x)(x.*sin(pi.*6.*x))./cos(mu_0.*(1-kappa).*x);
fun2_14=@(x)(x.*(1-x).^2.*sin(pi.*6.*x))./cos(mu_0.*(1-kappa).*x);
K_2n_6=2.*M1.*integral(fun2_13,kappa,1)-2.*M2.*integral(fun2_14,kappa,1);
fun2_15=@(x)(x.*sin(pi.*7.*x))./cos(mu_0.*(1-kappa).*x);
fun2_16=@(x)(x.*(1-x).^2.*sin(pi.*7.*x))./cos(mu_0.*(1-kappa).*x);
K_2n_7=2.*M1.*integral(fun2_15,kappa,1)-2.*M2.*integral(fun2_16,kappa,1);
fun2_17=@(x)(x.*sin(pi.*8.*x))./cos(mu_0.*(1-kappa).*x);
fun2_18=@(x)(x.*(1-x).^2.*sin(pi.*8.*x))./cos(mu_0.*(1-kappa).*x);
K_2n_8=2.*M1.*integral(fun2_17,kappa,1)-2.*M2.*integral(fun2_18,kappa,1);
fun2_19=@(x)(x.*sin(pi.*9.*x))./cos(mu_0.*(1-kappa).*x);
fun2_20=@(x)(x.*(1-x).^2.*sin(pi.*9.*x))./cos(mu_0.*(1-kappa).*x);
K_2n_9=2.*M1.*integral(fun2_19,kappa,1)-2.*M2.*integral(fun2_20,kappa,1);
%c2_1=(c1_1.*gamma.*xi.*R1.*(R2-r).^2)./(r.*(R2-R1).^2)+sum(R2./r.*exp(-
(mu_0.^2.*xi)./R2.^2).*(K_10.*sin((pi.*n.*r)./R2)+K_20.*cos((pi.*n.*r)./R2)));
c2_1=(c1_1.*gamma.*xi.*R1.*(R2-r).^2)./(r.*(R2-R1).^2)+sum(An./r.*exp(-
mu_0.^2.*xi./R2).*sin(mu_0.*r./R2)-tan(mu_0./d).*cos(mu_0.*r./R2)); %_for_real
figure(5)
tiledlayout(2,1);
nexttile
plot(tau,c1_1,'-b',LineWidth=2);
xlabel('Время(\tau)',FontSize=20);
ylabel('Концентрация',FontSize=20);
title('Первая концентрация в 1-й области по времени','fontsize',25);
legend('концентрация c^1_1')
nexttile
plot(x1,c1_1,'b',LineWidth=2);
xlabel('Размер(X)',FontSize=20);
ylabel('Концентрация',FontSize=20);
title('Первая концентрация в 1-й области по размеру','fontsize',25);
legend('концентрация c^1_1')
figure(6)
tiledlayout(2,1);
nexttile
plot(tau,c2_1,'-b',LineWidth=2);
xlabel('Время(\tau)',FontSize=20);
ylabel('Концентрация',FontSize=20);
title('Первая концентрация в 2-й области по времени','fontsize',25);
legend('концентрация c^2_1')
nexttile
plot(x2,c2_1,'b',LineWidth=2);
xlabel('Размер(X)',FontSize=20);
ylabel('Концентрация',FontSize=20);
title('Первая концентрация в 2-й области по размеру','fontsize',25);
legend('концентрация c^2_1')
T=[T1,T2];
C = [c1_1,c2_1];
S = linspace(0, 10, 20); % Model size
% Create meshgrid for the combinations of temperatures and concentrations
[T_grid, C_grid] = meshgrid(T, C);
% We assume that size values are similar across temperature and concentration combinations
% So we just replicate the size values for each combination
size_grid = repmat(S, length(T), 1); % Replicating size values for each pair of T and C
figure(7)

```

```

tiledlayout(2,2);
nexttile
plot(T1,c1_1,'-b',LineWidth=2);
xlabel('Температура',FontSize=20);
ylabel('Концентрация',FontSize=20);
title('3(А) Графики связи первой концентрации \newline и температур во внешней
области',fontsize=25);
nexttile
plot(T2,c2_1,'r',LineWidth=2);
xlabel('Температура',FontSize=20);
ylabel('Концентрация',FontSize=20);
title('3(Б) Графики связи первой концентрации \newline и температур во внутренней
области', 'fontsize', 25);
nexttile([1 2]);
% Plot the 3D surface
surf(size_grid, C_grid, T_grid, 'FaceAlpha', 0.7, 'EdgeColor', 'Black', 'FaceColor', 'interp');
xlabel('Размер(нм)',FontSize=20);
ylabel('Концентрация',FontSize=20);
zlabel('Температура(К)',FontSize=20);
title('3(В) Графики связи концентрации и температур в модели',FontSize=25);

```

Приложение Г. MATLAB коды для модификации алгоритма Хошена Копельмана

```

% Константы
k_B = 1.38e-23; % Постоянная Больцмана (J/K)
d = 3e-10; % Молекулярный диаметр (m)
P = 1.013e5; % Атмосферное давление (Pa)
L = 1e-6; % Характерная длина (m) ячеек сетки

% Параметры
gridSize = 10;
temperatures = [303, 323, 343]; % Температура в Кельвинах
probLiquidBase = 0.6; % Базовая вероятность наличия жидкости
probGasBase = 0.3; % Базовая вероятность наличия газа

% Циклически повторяйте каждую температуру
for tempIdx = 1:length(temperatures)
    T = temperatures(tempIdx);

    % Корректировка вероятностей в зависимости от температуры
    probLiquid = probLiquidBase * exp(-0.01 * (T - 303)); % Количество жидкости уменьшается с
    % повышением температуры
    probGas = probGasBase * exp(0.01 * (T - 303)); % Количество газа увеличивается с
    % повышением температуры
    probEmpty = 1 - (probLiquid + probGas); % Остаток пуст

    % Генерировать случайную сетку с вероятностями
    grid = zeros(gridSize);
    for i = 1:gridSize
        for j = 1:gridSize
            randVal = rand();
            if randVal < probEmpty
                grid(i, j) = 0; % Пустой
            elseif randVal < probEmpty + probLiquid
                grid(i, j) = 1; % Жидкость
            else
                grid(i, j) = 2; % Газ
            end
        end
    end
end

% Отобразить исходную сетку
figure;
imagesc(grid);
title(sprintf('Оригинальная сетка в T = %d K (0 = Пустой, 1 = Жидкость, 2 = Газ)', T), 'FontSize',
16);
colormap([1 1 1; 0 0 0; 0.5 0.5 0.5]); % Белый - пустой, черный - жидкий, серый - газообразный
colorbar('Ticks', [0.33, 1, 1.67], 'TickLabels', {'Пустой', 'Жидкость', 'Газ'});
axis square;

```

```

% Алгоритм Хошена-Копельмана
labels = zeros(gridSize, gridSize); % Инициализация меток
label = 0; % Начать подсчет меток
equivalence = 1:(gridSize^2); % Массив эквивалентностей

for i = 1:gridSize
    for j = 1:gridSize
        if grid(i, j) > 0 % Обрабатывать только непустые ячейки
            neighbors = [];
            if i > 1 && labels(i-1, j) > 0 % Сосед сверху
                neighbors = [neighbors labels(i-1, j)];
            end
            if j > 1 && labels(i, j-1) > 0 % Левый сосед
                neighbors = [neighbors labels(i, j-1)];
            end

            if isempty(neighbors)
                label = label + 1; % новая метка
                labels(i, j) = label;
            else
                min_label = min(neighbors); % Использовать наименьшую соседнюю метку
                labels(i, j) = min_label;
                for k = 1:length(neighbors)
                    equivalence = union_labels(min_label, neighbors(k), equivalence);
                end
            end
        end
    end
end

% Разрешить эквивалентности
for i = 1:gridSize
    for j = 1:gridSize
        if labels(i, j) > 0
            labels(i, j) = find_root(labels(i, j), equivalence);
        end
    end
end

% Replace labels with 0 (empty), 1 (liquid clusters), 2 (gas clusters)
labeledGrid = grid;
labeledGrid(grid == 1) = 1; % Жидкость
labeledGrid(grid == 2) = 2; % Газ
labeledGrid(grid == 0) = 0; % Пустой

% Отображать сетку с надписью
figure;
imagesc(labeledGrid);
title(sprintf('Помеченная сетка в T = %d К (0 = Пустой, 1 = Жидкость, 2 = Газ)', T), 'FontSize',
16);
colormap([1 1 1; 0 0 0; 0.5 0.5 0.5]); % белый для пустого, черный для жидкого, серый для
газообразного
colorbar('Ticks', [0.33, 1, 1.67], 'TickLabels', {'Пустой', 'Жидкость', 'Газ'});
axis square;

```

```

hold on;

% Add numerical labels
for i = 1:gridSize
    for j = 1:gridSize
        if labeledGrid(i, j) == 0
            text(j, i, '0', 'Color', 'black', 'FontSize', 12, 'HorizontalAlignment', 'center');
        elseif labeledGrid(i, j) == 1
            text(j, i, '1', 'Color', 'white', 'FontSize', 12, 'HorizontalAlignment', 'center');
        elseif labeledGrid(i, j) == 2
            text(j, i, '2', 'Color', 'black', 'FontSize', 12, 'HorizontalAlignment', 'center');
        end
    end
end
hold off;

% Вычислить и отобразить число Кнудсена и движение молекул
lambda_liquid = k_B * T / (sqrt(2) * pi * d^2 * P); % Предположим, что жидкость и газ имеют одну
и ту же формулу
lambda_gas = lambda_liquid;%Similar computation for this example

% Вычислить число Кнудсена
Kn_liquid = lambda_liquid / L;
Kn_gas = lambda_gas / L;

% Определение типа движения
if Kn_liquid < 0.01
    liquid_motion = 'Континуумный поток';
elseif Kn_liquid < 0.1
    liquid_motion = 'Скользящий поток';
elseif Kn_liquid < 10
    liquid_motion = 'Переходный поток';
else
    liquid_motion = 'Свободный молекулярный поток';
end

if Kn_gas < 0.01
    gas_motion = 'Континуумный поток';
elseif Kn_gas < 0.1
    gas_motion = 'Скользящий поток';
elseif Kn_gas < 10
    gas_motion = 'Переходный поток';
else
    gas_motion = 'Свободный молекулярный поток';
end

% Print results
fprintf('Температура: %d K\n', T);
fprintf(' Жидкость:\n');
fprintf('   Длина свободного пробега: %.2e m\n', lambda_liquid);
fprintf('   Число Кнудсена: %.2e\n', Kn_liquid);
fprintf('   Движение: %s\n', liquid_motion);
fprintf(' Газ:\n');
fprintf('   Длина свободного пробега: %.2e m\n', lambda_gas);

```

```
fprintf(' Число Кнудсена: %.2e\n', Kn_gas);
fprintf(' Движение: %s\n\n', gas_motion);
end

% Helper Functions
function root = find_root(x, equivalence)
    while equivalence(x) ~= x
        x = equivalence(x);
    end
    root = x;
end

function equivalence = union_labels(label1, label2, equivalence)
    root1 = find_root(label1, equivalence);
    root2 = find_root(label2, equivalence);
    if root1 < root2
        equivalence(root2) = root1;
    else
        equivalence(root1) = root2;
    end
end
```

Приложение Д. Акт о внедрении в учебный процесс

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Московский государственный технологический университет
«СТАНКИН»

«УТВЕРЖДАЮ»
проректор по образовательной
деятельности и молодежной политике
к.т.н.
М.В. Бильчук
2025 г



АКТ

внедрения в учебный процесс результатов диссертационной работы, представленной на
соискание ученой степени

кандидата физико-математических наук, выполненной автором

Пхью Вэй Лин

на тему «Моделирование тепло- и массопереноса и фазовых переходов в
высокодисперсных системах при воздействии электромагнитного поля»,
научная специальность 1.2.2. «Математическое моделирование, численные методы и
комплексы программ» (физико-математические науки),
научный руководитель д.ф.-м.н., профессор Уварова Л.А.

Результаты теоретических исследований в области математического
моделирования тепломассопереноса и фазовых переходов в дисперсных средах (в общем
случае, неоднородных), включая разработанные модели, алгоритмы и результаты
проведенных вычислительных экспериментов для двухслойных сферических частиц,
для двух частиц, рассматриваемых в бисферической системе координат, а также для
описания фазовых переходов с использованием теории перколяции внедрены в учебный
процесс в курсе бакалавриата «**Математическое моделирование**», согласно учебному
плану направления 09.03.03, профиль «Математическое и компьютерное моделирование
процессов и систем», в курсе магистратуры «**Методы моделирования мезо- и
наносистем**» согласно учебному плану направления 09.04.01, профиль «Компьютерное
моделирование сложных технических систем» ФГБОУ ВО «МГТУ «СТАНКИН».

Представитель подразделения,
в котором внедрена разработка:

Начальник
учебно-методического управления
к.т.н.

С.А. Тясто

Представители подразделения
разработчика:

Зав. кафедрой ПриМ
д.ф.-м. н.  Л.А. Уварова

Соискатель
 Пхью Вэй Лин