

**А. М. ЕГЕНОВА^{1*}, А. М. БРЕНЕР¹, С. Д. КУРАКБАЕВА¹,
А. Н. ЖИДЕБАЕВА², А. А. МУСАБЕКОВ¹**

¹Южно-Казахстанский Университет им. М. Ауэзова, Шымкент, Казахстан;

²Университет Дружбы народов им. А. Куатбекова, Шымкент, Казахстан

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕЛИНЕЙНОЙ ВОЛНОВОЙ МОДЕЛИ ЯВЛЕНИЙ ПЕРЕНОСА В СРЕДАХ С НЕЛОКАЛЬНЫМИ ЭФФЕКТАМИ

Основной вклад представленной статьи состоит в том, что были установлены достаточные предположения для модифицированного уравнения Уизема, описывающего нелинейное распространение волн для явлений переноса в физико-химических системах. Показано, что при выводе уравнений типа Уизема наличие пространственной нелокальности среды может играть фундаментальную роль. В статье также рассматриваются вопросы физической интерпретации исследуемой модели. Принципиальное наличие нелокальных эффектов в исследуемых системах может быть обосновано и получено в результате наличия доменов со сложно организованной пространственной структурой, а также наличия источников тепла и массы. Проведено компьютерное моделирование и получены результаты с использованием языка программирования Java.

Ключевые слова: ядро, интегральный оператор, релаксационное уравнение, бегущая волна, компьютерное моделирование, нелокальные эффекты.

Введение. Проблемы учета времен релаксации и дальнедействующих взаимодействий структурных элементов сред при математическом описании явлений переноса массы, тепла и количества движения представляют большой научный и практический интерес. Аналогичные проблемы возникают и при описании развития внутренних напряжений и образования трещин в твердых телах. Эти вопросы особенно актуальны при создании адекватных математических моделей высокоинтенсивных быстрых технологических процессов в условиях, когда корректность использования методов равновесной термодинамики становится проблематичной. В то же время известные методы неравновесной термодинамики [1-3] при полном их применении [4] сложны как с точки зрения расчета параметров, необходимых для оптимального контроля интенсивных процессов и с точки зрения анализа качественного состояния системы [5]. Например, для быстрых процессов выбор переходной стадии и стадии установления управляющих параметров становится неопределенным. При моделировании процессов переноса в наносистемах нелокальность законов переноса становится неизбежной. Принципиальная роль нелокальных эффектов в исследуемых системах может быть обоснована и получена как в результате наличия доменов со сложно организованной пространственной структурой [6], особенно с учетом возникновения и трансформации кластеров в различных моменты и различные положения в космосе, а также наличием источников тепла и массы.

Интегрально-дифференциальное уравнение Уизема – одна из моделей, эффективно описывающих нелинейные волны в сильно диспергирующих средах. Уравнение

* E-mail корреспондирующего автора: sevam@mail.ru

содержит характерную нелинейность конвективного типа в сочетании с дисперсией произвольного типа. Однако Г. Уизем предложил свое интегро-дифференциальное уравнение, сочетающее нелинейность, типичную для гидродинамики, и обобщенный закон дисперсии, без вывода и специальной интерпретации. Ранее было обнаружено [7], что уравнение такого типа может быть получено при описании распространения нелинейных волн в средах с пространственной нелокальностью методом релаксационных ядер переноса в случае линейной функции релаксации. Это предположение вряд ли согласуется с общей нелинейной природой разработанных моделей.

Основная новизна и вклад этой работы состоит в том, что были установлены достаточные предположения для вывода возмущенного уравнения Уизема, описывающего нелинейное распространение волн для явлений переноса в физико-химических системах в случае квадратичной функции релаксации. Показано, что при выводе уравнений типа Уизема наличие слабой пространственной нелокальности среды играет фундаментальную роль.

Методология и результаты исследования. Интегро-дифференциальное уравнение Уизема – это модель, которая эффективно описывает нелинейные волны в сильно диспергирующих средах. С другой стороны, запаздывающая форма ядра позволяет интерпретировать это уравнение как нелокальную форму [8-9].

$$u_t + uu_x + \int_{-\infty}^{+\infty} K(x-s)u_s(s,t)ds = 0 \quad (1)$$

Для упрощения формальных математических преобразований целесообразно ввести обозначение локального отклонения управляющего параметра, характеризующего состояние равновесия системы. Таким параметром тепловых процессов является температура; для процессов массопереноса – химический потенциал; для распространения внутренних дефектов твердых тел – это равновесные внутренние напряжения.

$$\Delta v = u. \quad (2)$$

Тогда выражение для потока вещества при небольших отклонениях от равновесия, но с учетом нелокальных эффектов различного рода, в частности, в средах с памятью, может быть записано в виде:

$$J = \int_{\Omega} N(\theta, u) \nabla u(s, t) ds. \quad (3)$$

Здесь N – ядро интегрального оператора, $\theta = x - s$

Интегрирование по частям приводит к выражению

$$J = \int_{\Omega} N(\theta, u) \nabla u(s, t) ds = uN(\theta, u)|_{\Gamma} + \int_{\Omega} u \frac{\partial N(\theta, u)}{\partial \theta} ds, \quad (4)$$

где Ω , Γ – область интегрирования и его границы.

Дальнейшие вычисления будут проводиться в приближении слабой нелокальности, поскольку без такого приближения неизбежно потребуется использование инструментов неравновесной термодинамики, что выходит за рамки целей данного исследования.

Это ограничение можно записать следующим образом

$$\lim_{|\theta| \rightarrow \infty} N(\theta, u) = 0. \quad (5)$$

Обозначим производную ядра в интегральном операторе уравнения (4) как

$$G(\theta, u) = \frac{\partial N(\theta, u)}{\partial \theta}. \quad (6)$$

Разложение оператора (6) в ряд Тейлора в окрестности равновесных значений управляющего параметра имеет вид

$$G(\theta, u) = \sum_k G_{(k)}(\theta) u^k. \quad (7)$$

Общий вид закона сохранения имеет вид

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \nabla J = 0. \quad (8)$$

где I – источник потока вещества в системе.

Использование закона сохранения с учетом (5) приводит к следующему уравнению

$$u_t = \nabla u_t \int_{\Omega} \left(\sum_k G_{(k)} u^{k+1} \right) ds = I. \quad (9)$$

Для успешной реализации дальнейших преобразований необходимо задать условие коммутации для операторов дифференцирования и свертки в уравнении (9). Поскольку на данном этапе преобразований вид ядер интегрального оператора неизвестен, это условие необходимо будет дополнительно проверить для конкретного типа физически значимых ядер. Тогда уравнение (9) можно переписать в виде

$$u_t + \int_{\Omega} \left(\sum_k (k+1) G_{(k)} u^k \right) u_s ds = I. \quad (10)$$

Дальнейшее развитие теории требует уточнения вида ядер оператора в уравнении (10). Для решения этой проблемы целесообразно использовать релаксационное уравнение первого порядка, характерное для релаксационных задач теоретической физики. Чтобы не нарушать логику нелинейного подхода, здесь, в отличие от работы Бренера [10], уравнение релаксации записано в общем виде.

$$\frac{d}{d\theta} G_{(k)}(\theta) + B_{(k)} \Phi(G_{(k)}(\theta)) = 0. \quad (11)$$

$\Phi(\bullet)$ должна быть положительной неубывающей функцией [11].

Представим эту функцию в виде степенного ряда:

$$\frac{d}{d\theta} G_{(k)}(\theta) + B_{(k)} \sum_{i=1}^{\infty} \lambda_i G_{(k)}^i(\theta) = 0. \quad (12)$$

Ограничение двумя первыми членами ряда приводит к выражению

$$\frac{d}{d\theta} G_{(k)}(\theta) + B_{(k)}(\lambda_1 G_{(k)}(\theta) + \lambda_2 G_{(k)}^2(\theta)) = 0. \quad (13)$$

Тогда можно показать, что физически значимая форма уравнения выглядит следующим образом:

$$\frac{d}{d\theta} G_{(k)}(\theta) + Y_{1,(k)} G_{(k)}(\theta) \pm Y_{2,(k)} G_{(k)}^2(\theta) = 0, \quad (14)$$

где $Y_{1,(k)} \geq 0$, и $Y_{2,(k)} \geq 0$.

Рассмотрим случай 1, когда $Y_{2,(k)} = 0$.

Уравнение для ядра релаксации принимает вид:

$$\frac{d}{d\theta} G_{(k)}(\theta) + Y_{(k)} G_{(k)}(\theta) = 0. \quad (15)$$

Простейшая эвристическая форма коэффициента в уравнении (15) гласит:

$$Y_{(k)} = \frac{\varphi_{(k)}}{r_{(k)}}. \quad (16)$$

Здесь $r_{(k)}$ – характерный пространственный масштаб для k -го порядка, а $\varphi_{(k)}$ – некоторый коэффициент для k -го порядка. Для согласования со слабонелинейным приближением и принятой формой уравнения потока (уравнение (3)) последовательность характерных пространственных масштабов должна образовывать убывающий ряд. Эти масштабы могут также оценивать характерные размеры доменов со сложно организованной пространственной структурой и, например, описывать возникновение и преобразование кластеров в разные моменты времени и в разных положениях пространства с учетом перекрестных эффектов.

Нетрудно доказать, что условие коммутации операторов дифференцирования и свертки для ядер всех рассмотренных форм выполняется. В соответствии с выбранной стратегией исключения членов более высокого, чем второй порядок, следующее уравнение может быть получено из уравнения (10).

Далее, после ряда громоздких, но несложных в математической технике преобразований, было получено следующее обыкновенное дифференциальное уравнение

$$(c - u_0)^2 \frac{d^2 u_0}{d\xi^2} = \frac{\varphi_{(0)} u_0^2}{r_{(0)}} \left[\frac{\varphi_{(0)} u_0^2}{\alpha r_{(0)}} + \left(\beta G_{(0)}^0 - \frac{c \varphi_{(0)}}{2r_{(0)}} \right) u_0 + c \left(\frac{c \varphi_{(0)}}{2r_{(0)}} - G_{(0)}^0 \right) \right], \quad (17)$$

где параметры α , β зависят от типа релаксационной функции в уравнении (11)

Последующий анализ с использованием метода фазовой плоскости показывает, что уравнения такого типа имеют решения в виде уединенной бегущей волны, способной распространяться на значительные расстояния с небольшим изменением профиля (Newell, 1987).

Для решения уравнения (17) был написан программный код на языке программирования Java и получены следующие результаты (рис. 1, рис 2):

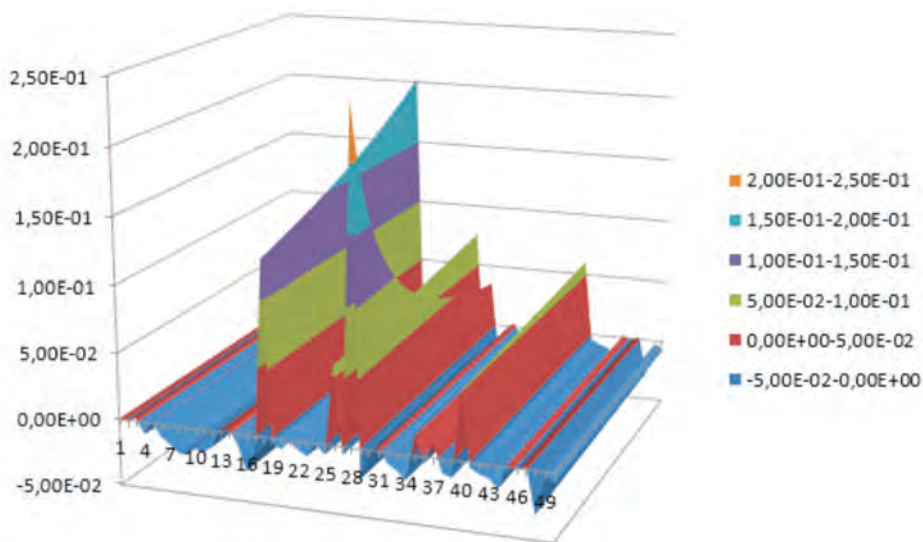


Рисунок 1 – Графическое изображение нелинейной волновой модели явлений переноса в средах с нелокальными эффектами

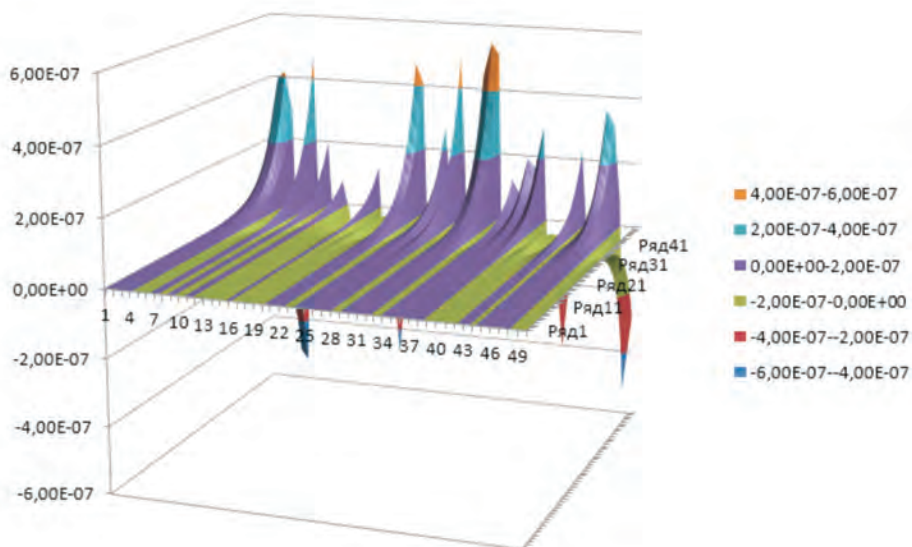


Рисунок 2 – Графическое изображение нелинейной волновой модели явлений переноса в средах с нелокальными эффектами при изменении параметров

Выводы. Впервые были изучены и описаны свойства нелокального интегрального соотношения для течения вещества в физико-химической системе с малым отклонением от состояния равновесия для нелинейной функции релаксации, устанавливающей зависимость ядра релаксации интегрального оператора от отклонения управляющий параметр. Подробно рассмотрены случаи как линейных, так и квадратичных функций релаксации.

Было обнаружено, что для квадратичной функции релаксации можно также привести уравнение переноса к виду возмущенного уравнения Уизема, описывающего развитие нелинейных волн переноса вещества в реакционной среде с нелокальными эффектами. В то же время остается открытым вопрос об общем виде ядер интегрального оператора в нелокальном законе переноса, при котором можно привести уравнение течения к типу Уизема. Этот вопрос должен стать предметом дальнейших исследований.

ЛИТЕРАТУРА

- 1 Iovane G. and Passarella F., 2004, Spatial behaviour in dynamical thermoelasticity backward in time for porous media. *J. Thermal Stresses*, 27, 2, 97.
- 2 Karličić D., Murmu T., Adhikari S., McCarthy M., 2015, *Non-local structural mechanics*, John Wiley & Sons, London, UK, NY, USA.
- 3 Kim L.A., Brener A.M., 1998, Non-local equations of heat and mass transfer with allowance for cross effects, *Theoretical Foundation of Chemical Engineering*, 32(3), – p. 213-215.
- 4 Jou D., Casas-Vazquez J., Criado-Sancho M., 2001, *Thermodynamics of Fluids Under Flow*, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg.
- 5 Kim L.A., Brener A.M., 1996, On the time non-locality in the heat and mass transfer equations for high-rate processes, *Theoretical Foundation of Chemical Engineering*, 30(3) – p. 233-235.
- 6 Gao Y., Oterkus S., 2019, Non-local modeling for fluid flow coupled with heat transfer by using peridynamic differential operator, *Engineering Analysis with Boundary Elements*, 105– p. 104–121.
- 7 Lyakhovsky V., Hamiel Y., Ben-Zion Y., 2011, A non-local visco-elastic damage model and dynamic fracturing, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 59. 1752–1776.
- 8 Diehl P. and Schweitzer M.A., 2015, *Simulation of Wave Propagation and Impact Damage in Brittle Materials Using Peridynamics*, Springer International Publishing Switzerland, Mehl M. et al. (eds.), *Recent Trends in Computational Engineering*, Lecture Notes in Computational Science and Engineering, 105 – p. 251-265.
- 9 Cheng-Chuan Lin and Fu-Ling Yanga, 2020, Continuum simulation for regularized non-local $\mu(I)$ model of dense granular flows, *Journal of Computational Physics* 420, 109708, 1-22.
- 10 Brener A.M., 2006, Nonlocal Equations of the Heat and Mass Transfer in Technological Processes, *Theoretical Foundations of Chemical Engineering*, 40(6). – p. 564–572.
- 11 Brener A., Balabekov B., Kaugaeva A., 2009, Non-local model of aggregation in polydispersed systems, *Chemical Engineering Transactions*, 17. – p. 783-788.

REFERENCES

- 1 Iovane G. and Passarella F., 2004, Spatial behaviour in dynamical thermoelasticity backward in time for porous media. *J. Thermal Stresses*, 27, 2, 97.
- 2 Karličić D., Murmu T., Adhikari S., McCarthy M., 2015, *Non-local structural mechanics*, John Wiley & Sons, London, UK, NY, USA.
- 3 Kim L.A., Brener A.M., 1998, Non-local equations of heat and mass transfer with allowance for cross effects, *Theoretical Foundation of Chemical Engineering*, 32(3), – p. 213-215.
- 4 Jou D., Casas-Vazquez J., Criado-Sancho M., 2001, *Thermodynamics of Fluids Under Flow*, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg.
- 5 Kim L.A., Brener A.M., 1996, On the time non-locality in the heat and mass transfer equations for high-rate processes, *Theoretical Foundation of Chemical Engineering*, 30(3) – p. 233-235.
- 6 Gao Y., Oterkus S., 2019, Non-local modeling for fluid flow coupled with heat transfer by using peridynamic differential operator, *Engineering Analysis with Boundary Elements*, 105– p. 104–121.

7 Lyakhovsky V., Hamiel Y., Ben-Zion Y., 2011, A non-local visco-elastic damage model and dynamic fracturing, Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 59. 1752–1776.

8 Diehl P. and Schweitzer M.A., 2015, Simulation of Wave Propagation and Impact Damage in Brittle Materials Using Peridynamics, Springer International Publishing Switzerland, Mehl M. et al. (eds.), Recent Trends in Computational Engineering, Lecture Notes in Computational Science and Engineering, 105 – p. 251-265.

9 Cheng-Chuan Lin and Fu-Ling Yanga, 2020, Continuum simulation for regularized non-local $\mu(I)$ model of dense granular flows, Journal of Computational Physics 420, 109708, 1-22.

10. Brenner A.M., 2006, Nonlocal Equations of the Heat and Mass Transfer in Technological Processes, Theoretical Foundations of Chemical Engineering, 40(6). – p. 564–572.

11 Brenner A., Balabekov B., Kaugaeva A., 2009, Non-local model of aggregation in polydispersed systems, Chemical Engineering Transactions, 17. – p. 783-788.

**А. М. ЕГЕНОВА¹, А. М. БРЕНЕР¹, С. Д. КУРАКБАЕВА¹,
А. Н. ЖИДЕБАЕВА², А. А. МУСАБЕКОВ¹**

¹М. Әуезов атындағы Оңтүстік Қазақстан Университеті, Шымкент;

²Ә.Қуатбеков атындағы Халықтар достығы университеті, Шымкент

ЖЕРГІЛІКТІ ЕМЕС ӘСЕРЛЕР БАР ОРТАДАҒЫ ТАСЫМАЛДАУ ҚҰБЫЛЫСТАРЫНЫҢ СЫЗЫҚТЫҚ ЕМЕС ТОЛҚЫНДЫҚ МОДЕЛІН КОМПЬЮТЕРЛІК МОДЕЛЬДЕУ

Ұсынылған мақалада физика-химиялық жүйелердегі тасымалдау құбылыстары үшін толқындардың сызықтық емес таралуын сипаттайтын өзгертілген Уизем теңдеуі үшін жеткілікті болжамдар жасалды. Уизем типті теңдеулерді шығарған кезде ортаның кеңістіктік локализациясының болуы негізгі рөл атқаруы мүмкін екендігі көрсетілген. Мақалада зерттелетін модельді физикалық түсіндіру мәселелерінде қарастырылады. Зерттелетін жүйелерде жергілікті емес әсерлердің түбегейлі болуы күрделі ұйымдастырылған кеңістіктік құрылымы бар домендердің болуы, сондай-ақ жылу мен масса көздерінің болуы нәтижесінде негізделуі және алынуы мүмкін. Компьютерлік модельдеу жүргізілді және Java бағдарламалау тілін қолдану арқылы нәтижелер алынды.

Түйін сөздер: ядро, интегралдық оператор, релаксация теңдеуі, жүгірмелі толқын, компьютерлік модельдеу, локальсіздік әсерлері

**A. M. EGENOVA¹, A. M. BRENER¹, S. D. KURAKBAYEVA¹,
A. N. ZHIDEBAYEVA², A. A. MUSABEKOV¹**

¹South Kazakhstan University named by M. Auezov, Shymkent;

²Peoples' Friendship University named by A. Kuatbekov, Shymkent

COMPUTER SIMULATION OF A NONLINEAR WAVE MODEL OF TRANSPORT PHENOMENA IN MEDIA WITH NON-LOCAL EFFECTS

The main contribution of the presented article is that sufficient assumptions have been established for the modified Witham equation describing nonlinear wave propagation for transport phenomena in

physicochemical systems. It is shown that when deriving Witham-type equations, the presence of spatial nonlocality of the medium can play a fundamental role. The article also discusses the issues of physical interpretation of the model under study. The principal presence of non-local effects in the studied systems can be justified and obtained as a result of the presence of domains with a complexly organized spatial structure, as well as the presence of heat and mass sources. Computer modeling was carried out and the results were obtained using the Java programming language.

Key words: *kernel, integral operator, relaxation equation, running wave, computer simulation, nonlocal effects.*