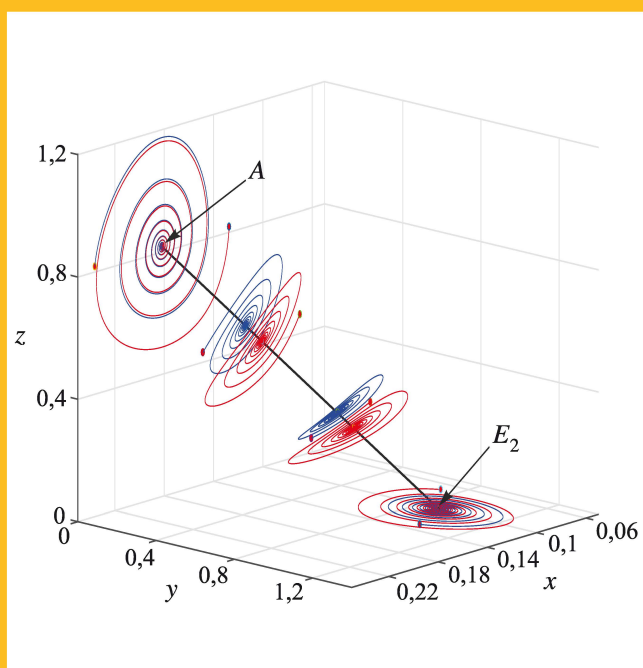


2024
Том 16
№ 4

ISSN 2076-7633 (Print)
ISSN 2077-6853 (Online)

Компьютерные исследования и моделирование



INNOPOLIS
UNIVERSITY

<http://crm.ics.org.ru>



КОМПЬЮТЕРНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ И МОДЕЛИРОВАНИЕ

2024 Том 16 № 4

СОДЕРЖАНИЕ

ОТ РЕДАКЦИИ

От редакции 821

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ И ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Божко А. Н., Ливанцов В. Э. Оптимизация стратегии геометрического анализа в автоматизированных системах проектирования 825

ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ И ОСНОВЫ ИХ РЕАЛИЗАЦИИ

Худхур Х. М., Халил И. Х. Удаление шума из изображений с использованием предлагаемого алгоритма трехчленного сопряженного градиента 841

МОДЕЛИ В ФИЗИКЕ И ТЕХНОЛОГИИ

Самсонов К. Ю., Кабанов Д. К., Назаров В. Н., Екомасов Е. Г. Локализованные нелинейные волны уравнения синус-Гордона в модели с тремя протяженными примесями 855

Клековкин А. В., Караваев Ю. Л., Килин А. А., Назаров А. В. Влияние хвостовых плавников на скорость водного робота, приводимого в движение внутренними подвижными массами 869

Долуденко А. Н., Куликов Ю. М., Савельев А. С. Хаотизация течения под действием объемной силы 883

Шаббир К., Извеков О. Я., Конюхов А. В. Моделирование двухфазного течения в пористых средах с использованием неоднородной сетевой модели 913

Pham Cong Thang, Phan Minh Nhat, Tran Thi Thu Thao. Image classification based on deep learning with automatic relevance determination and structured Bayesian pruning 927

Любушин А. А., Родионов Е. А. Анализ прогностических свойств тремора земной поверхности с помощью разложения Хуанга 939

АНАЛИЗ И МОДЕЛИРОВАНИЕ СЛОЖНЫХ ЖИВЫХ СИСТЕМ

- Беляев А. В.* Стохастические переходы от порядка к хаосу в метапопуляционной модели с миграцией 959
- Пантелеев М. А., Бершадский Е. С., Шибeko А. М., Нечипуренко Д. Ю.* Актуальные проблемы компьютерного моделирования тромбоза, фибринолиза и тромболизиса 975
- Хрущев С. С., Фурсова П. В., Плюснина Т. Ю., Ризниченко Г. Ю., Рубин А. Б.* Анализ скорости электронного транспорта через фотосинтетический цитохромный b_6f -комплекс . 997

МОДЕЛИ ЭКОНОМИЧЕСКИХ И СОЦИАЛЬНЫХ СИСТЕМ

- Ansori M. F., Al Jasir H., Sihombing A. H., Putra S. M., Nurfaizah D. A., Nurulita E.* Assessing the impact of deposit benchmark interest rate on banking loan dynamics 1023

COMPUTER RESEARCH AND MODELING

2024 Volume 16 Number 4

CONTENTS

FROM THE EDITOR

Editor's note 821

MATHEMATICAL MODELING AND NUMERICAL SIMULATION

Bozhko A. N., Livantsov V. E. Optimization of geometric analysis strategy in CAD-systems 825

NUMERICAL METHODS AND THE BASIS FOR THEIR APPLICATION

Khudhur H. M., Halil I. H. Noise removal from images using the proposed three-term conjugate gradient algorithm 841

MODELS IN PHYSICS AND TECHNOLOGY

Samsonov K. Yu., Kabanov D. K., Nazarov V. N., Ekomasov E. G. Localized nonlinear waves of the sine-Gordon equation in a model with three extended impurities 855

Klekovkin A. V., Karavaev Yu. L., Kilin A. A., Nazarov A. V. The influence of tail fins on the speed of an aquatic robot driven by internal moving masses 869

Doludenko A. N., Kulikov Yu. M., Saveliev A. S. Chaotic flow evolution arising in a body force field 883

Shabbir K., Izvekov O. Ya., Konyukhov A. V. Simulation of two-phase flow in porous media using an inhomogeneous network model 913

Pham Cong Thang, Phan Minh Nhat, Tran Thi Thu Thao. Image classification based on deep learning with automatic relevance determination and structured Bayesian pruning 927

Lyubushin A. A., Rodionov E. A. Analysis of predictive properties of ground tremor using Huang decomposition 939

ANALYSIS AND MODELING OF COMPLEX LIVING SYSTEMS

- Belyaev A. V.* Stochastic transitions from order to chaos in a metapopulation model with migration 959
- Panteleev M. A., Bershadsky E. S., Shibeko A. M., Nechipurenko D. Yu.* Current issues in computational modeling of thrombosis, fibrinolysis, and thrombolysis 975
- Khrushev S. S., Fursova P. V., Plusnina T. Yu., Riznichenko G. Yu., Rubin A. B.* Analysis of the rate of electron transport through photosynthetic cytochrome b_6f complex 997

MODELS OF ECONOMIC AND SOCIAL SYSTEMS

- Ansori M. F., Al Jasir H., Sihombing A. H., Putra S. M., Nurfaizah D. A., Nurulita E.* Assessing the impact of deposit benchmark interest rate on banking loan dynamics 1023

ОТ РЕДАКЦИИ

Мы продолжаем серию редакционных статей, направленных на то, чтобы дать читателям более объемное представление о материалах, представленных в журнале. Этот номер содержит пять тематических разделов: «Математические основы и численные методы моделирования», «Численные методы и основы их реализации», «Модели в физике и технологии», «Анализ и моделирование сложных живых систем» и «Модели экономических и социальных систем».

В статье А. Н. Божко и В. Э. Ливанцова об оптимизации стратегии геометрического анализа в автоматизированных системах проектирования рассматривается задача минимизации числа геометрических тестов в процессе сборки технических изделий с использованием их гиперграфовой модели на основе теоретико-игрового подхода. В работе представлена формализация задачи минимизации числа геометрических проверок при синтезе сборочных операций и процессов, которая основана на гиперграфовой модели механической структуры изделия. Задача минимизации поставлена как неантагонистическая игра лица, принимающего решение (ЛПР), и природы, в которой ЛПР принимает решение в условиях риска. Авторы описали основные стратегии рационального поведения и критерий принятия рациональных решений в данной игре.

В статье Н. М. Khudhur и I. H. Halil об удалении шума из изображений с использованием алгоритма трехчленного сопряженного градиента описывается новый подход в задаче восстановления изображений. Авторы предлагают новую модификацию эвристических методов трехчленного сопряженного градиента для шумоподавления в изображениях, представленных, например, в работе «A new family of hybrid three-term conjugate gradient methods with applications in image restoration», которую цитируют в статье. Авторы применили этот гибридный метод трехчленного сопряженного градиента (HYCGM) к проблеме восстановления изображений. Численные эксперименты показали перспективные результаты с точки зрения эффективности и применимости этого алгоритма. Предложенный алгоритм демонстрирует более высокую скорость и лучшие численные результаты по сравнению с алгоритмами Флетчера и Ревиса (FR) и трехчленного Флетчера и Ревиса (TTFR). Авторы также утверждают, что новый алгоритм может использоваться и в других приложениях, например искусственные нейронные сети, нечеткие нейронные сети, алгоритмы роевого интеллекта и т. д.

Статья К. Ю. Самсонова, Д. К. Кабанова, В. Н. Назарова и Е. Г. Екомасова о локализованных нелинейных волнах уравнения синус-Гордона в модели с тремя протяженными примесями посвящена рассмотрению различных решений, проявляющихся при формировании связанных локализованных нелинейных волн на трех одинаковых притягивающих протяженных «примесях», которые моделируются пространственной неоднородностью периодического потенциала. С помощью аналитических и численных методов авторами найдены локализованные волны бризерного и солитонного типа. С практической точки зрения результаты, полученные авторами, могут быть полезны при описании динамики волн намагниченности в мультислойных магнетиках.

Статья А. В. Клековкина, Ю. Л. Караваева, А. А. Килина и А. В. Назарова о влиянии хвостовых плавников на скорость водного робота, приводимого в движение внутренними подвижными массами, посвящена изучению динамики водного робота, приводимого в движение двумя эксцентриками. Авторы продолжают серию экспериментальных и теоретических исследований, описанных в серии работ, одна из которых опубликована в нашем журнале в 2018 году. В этих работах рассматривались роботы с корпусом эллиптической формы и килем, благодаря которому обеспечивалось продвижение. В настоящей работе авторы рассматривают рыбоподобную форму корпуса с хвостами различной жесткости. В частности, исследуется вопрос о скорости продвижения робота с различными хвостами.

В статье А. Н. Долуденко, Ю. М. Куликова и А. С. Савельева о хаотизации течения под действием объемной силы исследовано воздействие вынуждающей объемной гармонической силы на жидкость. Получено аналитическое решение для распределения скорости, давления и их производных. В работе представлены результаты численного моделирования с помощью пакета OpenFOAM и численных схем КАБАРЕ и МакКормака. Проведено сравнение этого моделирования с аналитическими результатами для таких параметров, как кинетическая энергия, скорость диссипации кинетической энергии, скорость диссипации вследствие сдвиговой вязкости, дилатационная диссипация, интегральная энтропия и интегральная палинтропия. Отмечено, что хаотизация поля течения наблюдается как при малых, так и при больших числах Рейнольдса.

В статье К. Шаббира, О. Я. Извекова и А. В. Конюхова о моделировании двухфазного течения в пористых средах с использованием неоднородной сетевой модели предложена новая математическая модель двухфазной несжимаемой фильтрации на основе неоднородной сети капиллярных трубок. С использованием предложенной модели, решены задача противоточной пропитки низкопроницаемого блока смачивающей жидкостью и задача двухфазного вытеснения в неоднородной среде с переменными по пространству фильтрационно-емкостными свойствами. На основе расчетов определены осредненные характеристики течений. Особенностью модели, реализованной авторами, является неоднородность сети капилляров. Предполагается, что трубки, составляющие сеть капилляров, имеют различный радиус. В рамках такой неоднородной сетевой модели авторы предлагают оригинальный способ распределения потоков жидкостей в узлах: смачивающая жидкость направляется в более тонкие капилляры, обеспечивая минимум поверхностной энергии контакта флюидов и скелета. В настоящее время влияние капиллярных сил на параметры многофазных течений в структурно неоднородных пористых средах представляет большой интерес в задачах нефтяного инжиниринга, экологических и других приложениях.

Статья С. Т. Pham, М. N. Phan и Т. Т. T. Tran о классификации изображений на основе глубокого обучения с автоматическим определением релевантности и структурированным байесовским отсечением посвящена поиску решения проблемы переобучения глубоких нейронных сетей, используемых для классификации изображений. В своей работе авторы вводят усеченное лог-равномерное априорное и усеченное лог-нормальное вариационное приближение, а также автоматическое определение релевантности с байесовскими глубокими нейронными сетями. Априорное распределение действует как регуляризатор, направляя процесс обучения к более простым решениям и уменьшая переобучение. Авторы тестировали модель на двух наборах данных: Канадского института перспективных исследований и набора данных макроскопических изображений древесины. На этих данных модель уменьшила переобучение в задачах классификации.

Статья А. А. Любушина и Е. А. Родионова об анализе прогностических свойств тремора земной поверхности с помощью разложения Хуанга посвящена изучению возможности использования информации о смещениях земной поверхности, регистрируемой с помощью GPS-станций, для прогнозирования сейсмических событий. Авторами исследованы данные за 15 лет, регистрируемые вблизи Японских островов. Выбор данной области обусловлен наличием в свободном доступе данных о движениях дневной поверхности (сайт Геодезической лаборатории Невады) и интенсивности произошедших землетрясений (сайт USGS). Таким образом, появляется возможность апробирования предлагаемых в работе методов выявления прогностических свойств. Предложенный процесс анализа данных со станций GPS многостадийный, содержит достаточно большое число «настраиваемых» параметров. Авторами детально излагается и обосновывается процедура последовательного подбора конкретных параметров, в частности разбиение станций на кластеры, выявление высокочастотной компоненты сигналов, проведение модовой декомпозиции. Отдельно оговаривается преодоление технических сложностей, встречающихся, например, при обработке граничных точек во временных рядах.

В статье А. В. Беляева о стохастических переходах от порядка к хаосу в метапопуляционной модели с миграцией рассматриваются стохастические эффекты в исследуемой модели. Каждая из подсистем моделируется отображением Рикера, при этом рассматривается случай, когда в условиях изоляции первая подсистема находится в равновесном режиме, а вторая — в хаотическом. Для детерминированной модели проведен бифуркационный анализ и локализованы параметрические зоны периодических и хаотических режимов. Методами прямого численного моделирования с использованием показателей Ляпунова исследованы стохастические переходы от порядка к хаосу. В исследовании индуцированных шумом переходов продемонстрированы возможности аналитического подхода, основанного на технике функции стохастической чувствительности и методе доверительных областей. Проведен сравнительный анализ воздействия случайных возмущений на циклы для трех зон порядка. Выявлены условия, при которых происходит переход периодического режима в хаотический.

Статья М. А. Пантелеева, Е. С. Бершадского, А. М. Шибеко и Д. Ю. Нечипуренко об актуальных проблемах компьютерного моделирования тромбоза, фибринолиза и тромболиза представляет собой обзор некоторых математических моделей процессов формирования артериальных и венозных тромбов. Ввиду того, что отдельным аспектам процесса и математическим моделям посвящено огромное число работ, авторы не претендуют на полноту охвата материала. Авторы обзора стремятся показать, где, на их взгляд, сосредоточены наиболее важные проблемы моделирования такого сложного процесса, как образование тромбов. Работа, несомненно, будет полезна исследователям, занимающимся различными аспектами свертывания крови.

Статья С. С. Хрущева, П. В. Фурсовой, Т. Ю. Плюсниной, Г. Ю. Ризниченко и А. Б. Рубина об анализе скорости электронного транспорта через фотосинтетический цитохромный b_6f -комплекс посвящена моделированию переноса электронов в центральном звене фотосинтетического электронного транспорта. b_6f -комплекс гомологичен цитохромному bc_1 -комплексу дыхательной цепи митохондрий и ряда бактерий и, в отличие от bc_1 -комплекса, гораздо менее исследован. Цитохромный b_6f -комплекс тем не менее имеет ряд отличий от bc_1 -комплекса: в частности, в нем больше кофакторов. В работе построена модель переноса электрона в b_6f -комплексе с учетом всех возможных реакций. Полученные результаты интересны для исследователей фотосинтеза и цитохромного b_6f -комплекса; в частности, построенная модель может быть основой для моделирования других комплексов фотосинтетической и дыхательных цепей. Статья хорошо сочетает в себе описание математического аппарата и его применения к решению проблемы характеристики реакций переноса в b_6f -комплексе.

Статья М. F. Ansori, H. Al. Jasir, A. H. Sihombing, S. M. Putra, D. A. Nurfaizah и E. Nurulita об оценке влияния базовой процентной ставки по депозитам на динамику банковских кредитов описывает проблему управления процентными ставками коммерческих банков путем изменения базовой процентной ставки по депозитам регулятора. Предложена формализация задачи путем введения соответствующих переменных и предположения о некоторых соотношениях между ними. Приведен анализ равновесия динамики кредитов теоретическими и численными методами. Работа представляет собой интересное теоретическое исследование в области моделирования процесса ценообразования на банковские продукты и реакции этого процесса на параметр базовой ставки.

Мы надеемся, что данный материал позволит вам лучше ориентироваться в этом номере журнала и привлечет более пристальное внимание к какой-либо из опубликованных статей.

*С уважением от имени редакции,
Н. Митин*

УДК: 519.876.5

Оптимизация стратегии геометрического анализа в автоматизированных системах проектирования

А. Н. Божко^а, В. Э. Ливанцов^б

Московский государственный технический университет им. Н. Э. Баумана,
Россия, 105005, Москва, ул. 2-я Бауманская, д. 5, стр. 1

E-mail: ^а bozhkoan@bmstu.ru, ^б viktor.livantsov@yandex.ru

Получено 30.09.2023, после доработки — 01.06.2024.

Принято к публикации 07.06.2024.

Автоматизация проектирования процессов сборки сложных изделий — это важная и сложная научно-техническая проблема. Последовательность сборки и содержание сборочных операций в значительной степени зависят от механической структуры и геометрических свойств изделия. Приведен обзор методов геометрического моделирования, которые применяются в современных системах автоматизированного проектирования. Моделирование геометрических препятствий при сборке методами анализа столкновений, планирования перемещений и виртуальной реальности требует очень больших вычислительных ресурсов. Комбинаторные методы дают только слабые необходимые условия геометрической разрешимости. Рассматривается важная задача минимизации числа геометрических проверок при синтезе сборочных операций и процессов. Формализация этой задачи основана на гиперграфовой модели механической структуры изделия. Эта модель дает корректное математическое описание когерентных и секвенциальных сборочных операций, которые доминируют в современном дискретном производстве. Введено ключевое понятие геометрической ситуации. Это такая конфигурация деталей при сборке, которая требует проверки на свободу от препятствий, и эта проверка дает интерпретируемые результаты. Предложено математическое описание геометрической наследственности при сборке сложных изделий. Аксиомы наследственности позволяют распространить результаты проверки одной геометрической ситуации на множество других ситуаций. Задача минимизации числа геометрических тестов поставлена как неантагонистическая игра ЛПР и природы, в которой требуется окрасить вершины упорядоченного множества в два цвета. Вершины представляют собой геометрические ситуации, а цвет — это метафора результата проверки на свободу от коллизий. Ход ЛПР заключается в выборе неокрашенной вершины, ответ природы — это цвет вершины, который определяется по результатам моделирования данной геометрической ситуации. В игре требуется окрасить упорядоченное множество за минимальное число ходов. Обсуждается проектная ситуация, в которой ЛПР принимает решение в условиях риска. Предложен способ подсчета вероятностей окраски вершин упорядоченного множества. Описаны основные чистые стратегии рационального поведения в данной игре. Разработан оригинальный синтетический критерий принятия рациональных решений в условиях риска. Предложены две эвристики, которые можно использовать для окрашивания упорядоченных множеств большой мощности и сложной структуры.

Ключевые слова: сборка, последовательность сборки, СААР-система, САПР, анализ геометрических препятствий

UDC: 519.876.5

Optimization of geometric analysis strategy in CAD-systems

A. N. Bozhko^a, V. E. Livantsov^b

Bauman Moscow State University,
5/1 2-ya Baumanskaya st., Moscow, 105005, Russia

E-mail: ^a bozhkoan@bmstu.ru, ^b viktor.livantsov@yandex.ru

Received 30.09.2023, after completion — 01.06.2024.

Accepted for publication 07.06.2024.

Computer-aided assembly planning for complex products is an important engineering and scientific problem. The assembly sequence and content of assembly operations largely depend on the mechanical structure and geometric properties of a product. An overview of geometric modeling methods that are used in modern computer-aided design systems is provided. Modeling geometric obstacles in assembly using collision detection, motion planning, and virtual reality is very computationally intensive. Combinatorial methods provide only weak necessary conditions for geometric reasoning. The important problem of minimizing the number of geometric tests during the synthesis of assembly operations and processes is considered. A formalization of this problem is based on a hypergraph model of the mechanical structure of the product. This model provides a correct mathematical description of coherent and sequential assembly operations. The key concept of the geometric situation is introduced. This is a configuration of product parts that requires analysis for freedom from obstacles and this analysis gives interpretable results. A mathematical description of geometric heredity during the assembly of complex products is proposed. Two axioms of heredity allow us to extend the results of testing one geometric situation to many other situations. The problem of minimizing the number of geometric tests is posed as a non-antagonistic game between decision maker and nature, in which it is required to color the vertices of an ordered set in two colors. The vertices represent geometric situations, and the color is a metaphor for the result of a collision-free test. The decision maker's move is to select an uncolored vertex; nature's answer is its color. The game requires you to color an ordered set in a minimum number of moves by decision maker. The project situation in which the decision maker makes a decision under risk conditions is discussed. A method for calculating the probabilities of coloring the vertices of an ordered set is proposed. The basic pure strategies of rational behavior in this game are described. An original synthetic criterion for making rational decisions under risk conditions has been developed. Two heuristics are proposed that can be used to color ordered sets of high cardinality and complex structure.

Keywords: assembly, assembly sequence, CAAP-system, CAD, analysis of geometric obstacles

Citation: *Computer Research and Modeling*, 2024, vol. 16, no. 4, pp. 825–840 (Russian).

Введение

Автоматизированное проектирование процессов сборки сложных изделий (computer aided assembly planning, СААР) — это важная и актуальная научно-техническая проблема. Она активно обсуждается в современных публикациях [Ghandi, Masehian, 2015].

Состав и содержание сборочных операций в значительной степени зависят от геометрии деталей и механической структуры изделия. Монтаж детали возможен, если существует свободное от столкновений перемещение детали в служебное положение в собираемой машине или приборе. При разработке процессов сборки в СААР-системах анализ препятствий необходимо выполнять многократно. В общем случае он требуется для каждой монтажной операции и всех вариантов ее исполнения. Это может приводить к факториальному росту сложности этой проектной процедуры в зависимости от числа деталей [Ghandi, Masehian, 2015]. Геометрические модели, которые используются для описания деталей в современных СААР-системах, не учитывают многочисленные конструктивно-технологические ограничения на сборку. В первую очередь это структурные ограничения, которые порождаются системой механических связей элементов изделия.

Для выбора рациональной последовательности сборки требуется множество альтернатив достаточно высокой мощности. Генерация такого множества при помощи самых развитых СААР-систем требует чрезмерно высоких вычислительных и временных затрат. Кроме того, геометрические решатели этих систем часто анализируют такие конфигурации деталей, которые заведомо не могут быть реализованы на практике.

Для повышения эффективности процедуры геометрического анализа в СААР-системах требуется разработать метод минимизации проверок на свободу от коллизий при сборке сложных технических систем. Он должен учитывать ограничения на последовательность и содержание сборочных операций, которые порождает структура механических связей изделия.

Модели и методы, которые применяются для моделирования геометрических препятствий в современных автоматизированных системах проектирования, можно разделить на четыре группы [Jiménez, Thomas, Torras, 2001; González et al., 2015; Yin, Ding, Xiong, 2004; Божко, Родионов, 2022] (рис. 1).

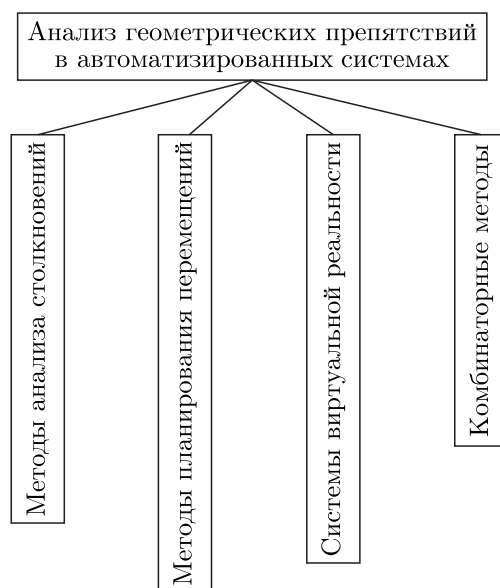


Рис. 1. Классификация методов анализа геометрических препятствий в автоматизированных системах

Методы анализа столкновений

Методы анализа столкновений (collision detection) основаны на моделировании движения детали в среде с препятствиями. Проверяется пересечение модели детали со статическими элементами технологической системы. Мобильный и все статические объекты представляются простыми геометрическими фигурами: сферами, параллелепипедами, полиэдрами, выпуклыми оболочками и др. [Jiménez, Thomas, Torras, 2001].

Детали современных изделий могут иметь сложную геометрическую форму, поэтому их аппроксимация простыми оболочками часто не обеспечивает необходимую точность моделирования. Применение этих методов в СААР-системах требует высоких вычислительных ресурсов и часто не позволяет получить необходимую точность результатов.

В [Eng et al., 1999] описаны эвристические правила, которые позволяют уменьшить трудоемкость геометрического анализа при сборке сложных изделий.

- Детали, которые не имеют общих поверхностей с выбранной деталью, очевидно, не могут образовывать локальных препятствий при разборке, поэтому они исключаются из геометрического анализа.
- Не проверяются детали, у которых нет степеней свободы в направлении разборки.

В [Miller, Hofman, 2000] описан метод прямого анализа геометрических препятствий. Детали аппроксимируются прямоугольными оболочками. Из вершин оболочки проводят лучи в направлении разборки изделия. Проверяют пересечение лучей с собранной частью изделия.

В [Hoffman, 1991] предложен геометрический решатель СААР-системы BRAEN (В-гер Assembly Engine). В этой системе все детали изделия представляются моделями В-гер, которые состоят из кусков бисплайновых поверхностей. Эксперт выбирает прямолинейное направление разборки. Куски геометрической модели мобильной детали по очереди перемещаются в заданном направлении. Проверяют пересечение подвижных и статических кусков.

В [Romney et al., 1995] предложен способ идентификации препятствий по проекциям деталей на выбранную проекционную плоскость. Если проекции двух деталей не пересекаются, то в направлении перпендикуляра к проекционной плоскости они не образуют препятствий друг для друга. В противном случае нужно выбрать другое направление разборки и повторить проверку.

В [Pan, Smith, Smith, 2005] предложен развитый метод геометрического анализа, основанный на прямом моделировании препятствий. Рассматриваются прямолинейные траектории сборки/разборки в шести направлениях: $\pm x$, $\pm y$, $\pm z$. Для каждого направления формируется матрица «непересечений» (interference-free matrix). Это квадратная матрица $\bar{A} = \|a_{ij}\|_{n \times n}$, где n — число деталей изделия. Элемент $a_{ij} = 1$ тогда и только тогда, когда деталь j не создает препятствий для детали i при перемещении последней вдоль одной из координатных осей. Предложен способ извлечения геометрических данных из STEP-файла, необходимых для формирования матриц непересечения.

Методы планирования перемещений

Методы планирования перемещений (motion planning) активно разрабатываются и применяются в современной робототехнике. В [Weiwei, Kensuke, Kazuyuki, 2018; Halperin, Latombe, Wilson, 2000] описано использование этой парадигмы для автоматизированного проектирования сборочных планов. Изделие рассматривается как геометрическая система, в которой действуют только геометрические ограничения на перемещения деталей, а каждая деталь считается абсолютно твердым телом. Поиск допустимой траектории перемещения выполняется в шестимерном конфигурационном пространстве, в котором мобильная деталь представляется точкой.

Для решения данной задачи в основном используются различные модификации метода PRM (probabilistic roadmap method). Применение методов данной группы в СААП-системах ограничивается их высокой трудоемкостью, которая вызвана большой размерностью конфигурационного пространства.

Методы виртуальной реальности

Методы этой группы основаны на прямом анализе геометрических препятствий в системе виртуальной реальности (virtual reality, VR), средствами которой выполняется прототипирование сборочных операций и процессов. Оператор системы VR выполняет сборку цифровой модели изделия. Технические и программные средства VR обеспечивают погружение в трехмерную компьютерную реальность при помощи развитых средств визуального, тактильного и аудиоуправления [Seth, Vance, Oliver, 2011; Schenk, Straßburger, Kießner, 2005]. Методы виртуальной реальности широко применяются в современной промышленной практике: автомобилестроении, станкостроении и пр. Методы этой группы часто не обеспечивают высокую точность моделирования и не дают оснований для принятия оптимальных проектных решений.

Комбинаторные методы

Комбинаторные методы анализа препятствий основаны не на моделировании движения детали, а на исследовании локальной геометрии изделия. Как правило, методы этой группы позволяют формализовать только необходимые условия сборки/разборки. Это дает возможность отбросить заведомо нереализуемые проектные альтернативы без прямой проверки на свободу от столкновений.

Метод направленных блокирующих графов (directional blocking graph, *db*-граф) предложен в [Wilson, Latombe, 1994]. *Db*-граф представляет собой ориентированный граф, который описывает локальные препятствия при движении детали вдоль заданного прямолинейного направления. В терминах данной модели описаны необходимые условия разбираемости изделия в выбранном направлении.

В [Wilson, 1992] предложено обобщение *db*-графов — так называемые *ndb*-графы (non-directional blocking graphs). *Ndb*-граф — это разбиение полного телесного угла на секторы, в пределах которых не меняется *db*-граф, описывающий структуру локальных препятствий изделия. Предложен метод, который позволяет использовать данный аппарат для нелинейных траекторий разборки.

В [Krishnan, Sanderson, 1991] обсуждается поиск прямолинейных перемещений деталей при сборке/разборке изделия. Показано, что множество возможных траекторий такого вида является выпуклым полиэдральным конусом (polyhedral convex cone, *PCC*) в трехмерном пространстве. В статье предложен метод расчета *PCC*. Деталь не может быть удалена из состава изделия, если ее $PCC = \emptyset$.

В [Su, 2009] описан способ анализа геометрических препятствий при помощи пучка лучей. Предложена формализация так называемых минимальных блокирующих множеств (minimal constraint assembly state, MCAS). MCAS — это минимальное по составу множество деталей, которое препятствует движению детали при разборке изделия. Деталь должна быть собрана прежде, чем смонтировано ее минимальное блокирующее множество. При помощи MCAS можно сформировать некоторое отношение частичного порядка на множестве деталей. Для генерации MCAS(x) необходимо найти минимальную ДНФ характеристической булевой функции, которая формализует геометрические препятствия детали x .

Комбинаторный метод анализа локальных геометрических препятствий предложен в [Woo, Dutta, 1991]. Моделируется разборка изделия, в которой разрешены только прямолинейные движения деталей. Принято предположение о том, что все поверхности контакта деталей являются

кусками полиэдров. Сопряжения более сложной формы (цилиндрические, сферические и пр.) аппроксимируются при помощи фрагментов плоскостей. Совокупность векторов, которые задают прямолинейные движения при демонтаже деталей, образуют телесный угол в пространстве. Показано, что если этот угол больше развернутого, то демонтаж детали невозможен.

В [Srinivasan, Gadh, 2002] рассмотрена задача частичной разборки изделия (selective disassembly). Предложена модель, которая описывает геометрические препятствия при демонтаже деталей. Это так называемый *ri*-граф (removal influence graph), который описывает глубину вложения деталей в собранное изделие. Показано, что топологическая сортировка вершин ориентированного *ri*-графа представляет собой математическое описание возможной последовательности разборки изделия.

Рассмотренные подходы к моделированию геометрических препятствий при сборке/разборке изделия имеют ряд общих недостатков.

1. Они не учитывают структуру механических связей (соединений и сопряжений) изделия. По этой причине геометрический анализ может выполняться для заведомо нереализуемых проектных альтернатив, которые не обладают связностью и устойчивостью.
2. Геометрические проверки, вне зависимости от способа реализации, отличаются высокой вычислительной сложностью. В рассмотренных работах не ставится задача минимизации числа необходимых геометрических тестов.

Гиперграфовая модель механической структуры изделия

В современных CAD- и CAAP-системах принимается гипотеза о том, что на ранних этапах проектирования детали изделия являются абсолютно твердыми и невесомыми телами. В [Божко, 2018] показано, что при этом предположении адекватной математической моделью механической структуры изделия является так называемый *s*-гиперграф.

Приведем необходимые формальные определения. Изделию поставим в соответствие гиперграф $H = (X, R)$, у которого множество вершин $X = \{x_i\}_{i=1}^n$ представляет детали изделия, а множество ребер $R = \{r_j\}_{j=1}^m$ описывает минимальные геометрически координированные группировки деталей, полученные базированием по внутренним конструкторским базам (полные конструкторские базы)

На рис. 2 изображены конструкция крепления вала (а) и гиперграф H_a данной конструкции (б).

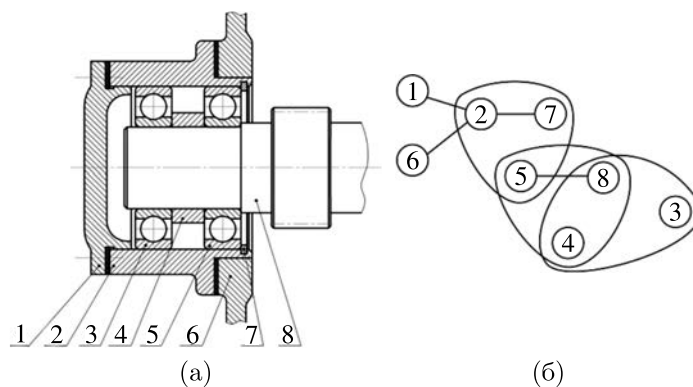


Рис. 2. Конструкция крепления вала (а), гиперграф H_a , который описывает механическую структуру данной конструкции (б). Вершины помечены числами, которые соответствуют номерам деталей

Подавляющее большинство современных технических систем (машин, механических приборов и др.) собираются посредством так называемых секвенциальных и когерентных сборочных операций [Божко, 2018; Божко, 2009; Божко, Родионов, 2022; Рыков, 2009]. Таковыми являются операции, которые реализуют одну или несколько механических связей (когерентность) и выполняются при помощи двух рабочих органов (секвенциальность).

Математическим описанием таких операций служит стягивание ребер второй степени гиперграфа $H = (X, R)$ (нормальное стягивание). Математической моделью сборочного плана служит последовательность нормальных стягиваний, которая преобразует $H = (X, R)$ в одновершинный гиперграф без петель [Божко, 2009].

На рис. 3 показана последовательность нормальных стягиваний гиперграфа H_a , которая описывает план сборки крепления вала.

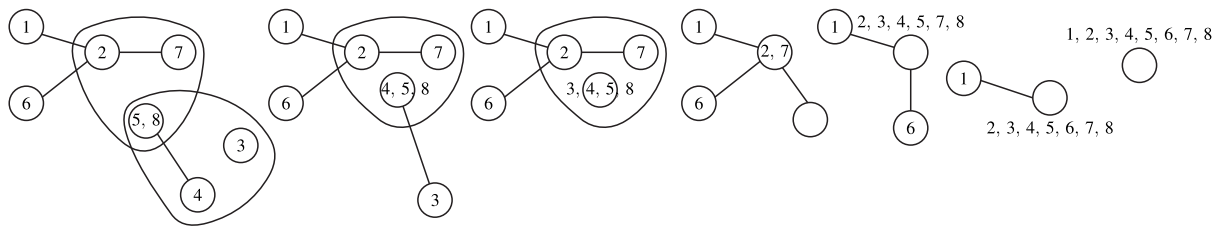


Рис. 3. Последовательность нормальных стягиваний гиперграфа H_a . Каждый следующий гиперграф получается из предыдущего стягиванием одного ребра второй степени. Данная последовательность гиперграфов представляет собой математическое описание плана сборки конструкции крепления вала, каждая операция которого обладает свойствами когерентности и секвенциальности

Определение 1. Гиперграф, который некоторой последовательностью нормальных стягиваний ребер преобразуется в одновершинный гиперграф без петель, называется s -гиперграфом.

Механическая структура изделия, которое может быть собрано при помощи когерентных секвенциальных операций, представляется в виде s -гиперграфа. Любой связный и координированный фрагмент технической системы (узел, сборочная единица и др.), который может быть собран независимо, описывается в виде s -подграфа s -гиперграфа.

Геометрические ситуации и геометрическая наследственность

Если задан s -гиперграф, то любой его s -подграф однозначно определяется множеством вершин.

Определение 2. Множество вершин s -подграфа будем называть s -множеством.

Пусть $A \subseteq X$ — s -множество, а $x \in X$ — деталь.

Определение 3. Пару (A, x) назовем геометрической ситуацией (ситуацией), если $A \cup \{x\}$ является s -множеством.

Геометрические ситуации формализуют такие конструктивные фрагменты, для которых проверка на геометрическую разрешимость имеет смысл и дает интерпретируемые результаты.

Определение 4. Ситуацию (A, x) назовем разрешенной, если установка x на собранный фрагмент A возможна, и запрещенной — в противном случае (рис. 4).

На рис. 4 показаны примеры двух ситуаций при установке подшипника на вал: разрешенная (а) и запрещенная (б).

Пусть (A, x) и (B, x) — две геометрические ситуации такие, что $A \subseteq B$.

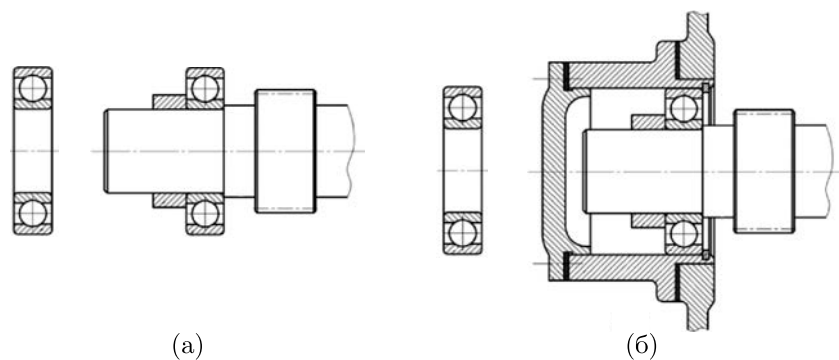


Рис. 4. Разрешенная геометрическая ситуация. Установка подшипника возможна (а). Запрещенная геометрическая ситуация. Установка подшипника невозможна (б)

Утверждение 1. Если ситуация (A, x) является запрещенной, то и (A, x) — запрещенная.

Утверждение 2. Если ситуация (B, x) — разрешенная, то и (A, x) является разрешенной.

Рассмотрим множество всех ситуаций $GS(x)$, связанных с установкой детали x . Введем на нем частичный порядок, индуцированный включением левых частей ситуаций, то есть $(A, x) \leq (B, x)$ тогда и только тогда, когда $A \subseteq B$.

На рис. 5 показаны конструкция приводного вала (а) и упорядоченное множество $GS(3)$ (б), описывающее все ситуации установки детали 3.

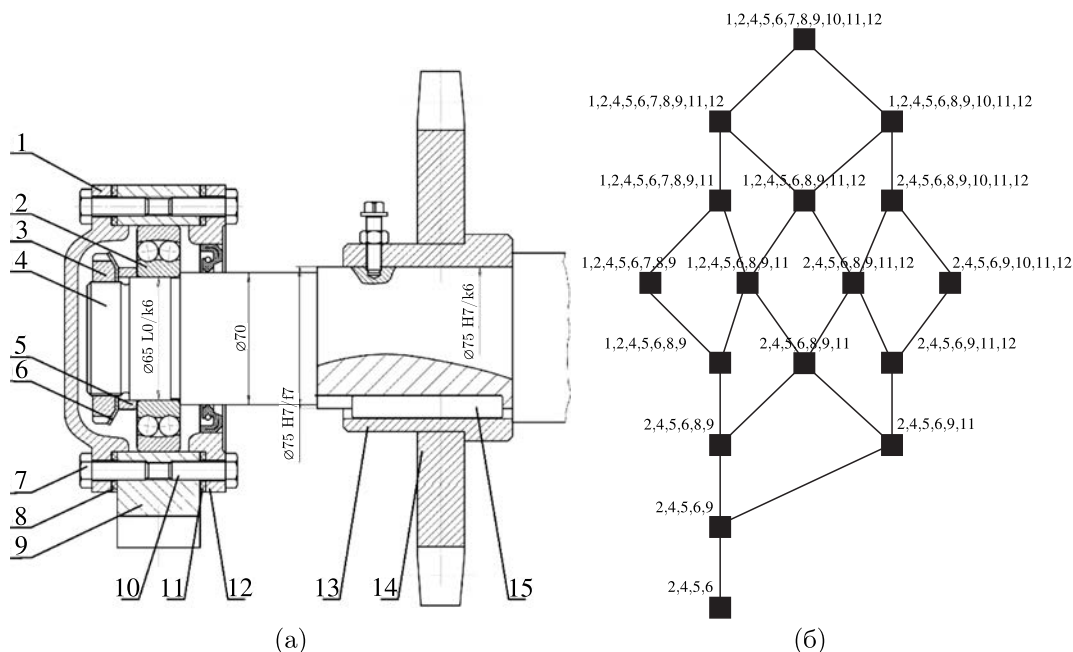


Рис. 5. Приводной вал (а). Упорядоченное множество всех геометрических ситуаций $GS(3)$, связанных с установкой гайки 3. Вершины упорядоченного множества представляют собой левые части геометрических ситуаций, на которые возможна установка детали 3 (б)

Игра $\Gamma(GS)$. Основные положения

Пусть выбрана для проверки геометрическая ситуация (A, x) , которой соответствует определенная вершина упорядоченного множества $GS(x)$. Если проверка на свободу от препятствий

дала положительный результат (то есть данная ситуация разрешимая), то все вершины, сравнимые с (A, x) и расположенные ниже нее, также будут разрешимыми. И наоборот, если проверка дала отрицательный результат, то все сравнимые вершины выше нее будут неразрешимыми.

Далее будем изображать вершины, описывающие неразрешимые ситуации, черным цветом, а разрешимые — белым. Задачу анализа геометрических препятствий можно сформулировать как игру лица, принимающего решение (ЛПР), и природы по окрашиванию вершин упорядоченного множества $GS(x)$ в два цвета.

Игра начинается с неокрашенного множества $GS(x)$. Ход ЛПР заключается в выборе неокрашенной вершины. Ответ природы — это цвет вершины: черный или белый. Если вершина черная, то все вершины верхнего конуса получают черный цвет. Если вершина белая, то все вершины нижнего конуса окрашиваются в белый цвет. После этого игра продолжается на оставшейся неокрашенной части упорядоченного множества $GS(x)$. Требуется выбрать такую последовательность вершин, которая окрашивает все множество за наименьшее число ходов.

Более формально: пусть P — произвольное упорядоченное множество и $y \in P$ — его элемент. Обозначим через $y^\Delta = \{a \in P \mid a \geq y\}$ и $y^\nabla = \{a \in P \mid a \leq y\}$ верхний и нижний конусы элемента y в P . Введем компактное обозначение:

$$y_i^{\text{con}} = \begin{cases} y_i^\Delta, & \text{если вершина } y_i \text{ черная,} \\ y_i^\nabla, & \text{если вершина } y_i \text{ белая.} \end{cases}$$

Стратегия первого игрока представляет собой последовательность вершин $(y_1, y_2, \dots, y_k)$, $y_i \in GS$, $i = \overline{1, k}$, такую, что $GS_1 = GS \setminus y_1^{\text{con}}$, $GS_2 = GS_1 \setminus y_2^{\text{con}}$, $\dots$, $GS_k = GS_{k-1} \setminus y_k^{\text{con}}$ и $GS_k = \emptyset$. Оптимальной стратегией ЛПР является последовательность вершин минимальной длины.

Обозначим эту игру как $\Gamma(GS)$. Отметим две ее особенности. Во-первых, это неантагонистическая игра, поскольку второму игроку (природе) не важен результат и он не способен на осмысленные стратегические действия. Во-вторых, комбинаторное разнообразие упорядоченных множеств чрезвычайно велико, поэтому поиск оптимального аналитического решения для общего случая заведомо обречен на неуспех. Это делает невозможным применение классического аппарата теории игр для решения данной задачи.

Выбор цвета вершины упорядоченного множества — это метафора геометрического теста, в результате которого проверяется возможность установки детали на некоторый собранный фрагмент изделия. Проверка на свободу от геометрических препятствий может быть выполнена любым методом, который удобен или доступен в данной проектной ситуации (см. рис. 1). Это массовая операция, которая должна быть осуществлена для каждой детали и каждого плана сборки изделия. Поэтому совокупные вычислительные затраты на геометрический анализ при автоматизированном проектировании процессов сборки сложных технических систем могут быть очень велики. Рациональная стратегия окрашивания упорядоченного множества $GS(x)$ позволяет сократить количество необходимых проверок на геометрическую разрешимость.

Представим игру $\Gamma(GS)$ как задачу принятия решений (ЗПР) с платежной матрицей, общий вид которой изображен на рис. 6.

	X	X^1	X^2	$\dots$	X^n
Y	$Y_1 = \text{черный}$	e_{11}	e_{12}	$\dots$	e_{1n}
	$Y_2 = \text{белый}$	e_{21}	e_{22}	$\dots$	e_{2n}

Рис. 6. Платежная матрица игры $\Gamma(GS)$ в условиях полной неопределенности. В этой матрице X и Y — первый (ЛПР) и второй (природа) игроки. X^j — ходы ЛПР, Y_i — ответы природы. e_{ij} — выигрыш ЛПР при выборе хода X^j и ответе природы Y_i

На этом рисунке X — лицо, принимающее решение; Y — природа; X^j , $j = \overline{1, n}$, — ходы ЛПР. Ход ЛПР заключается в выборе неокрашенной вершины упорядоченного множества GS . Ответы природы Y_1, Y_2 — это цвет выбранной вершины. Элемент матрицы e_{ij} , $i = \overline{1, 2}$, $j = \overline{1, n}$, — выигрыш, который получит ЛПР при выборе хода X^j и ответе природы Y_i . Этот выигрыш равен мощности конуса вершины в упорядоченном множестве GS : верхнего — если вершина черная, нижнего — если вершина белая.

В [Божко, 2009] рассмотрены способы решения этой ЗПР в условиях полной неопределенности. В этой информационной ситуации при любом ходе ЛПР ответы природы полагаются равновероятными. Для выбора оптимальных решений использованы классические критерии Вальда, Лапласа, Севиджа, Ходжа – Лемана и др. Выполнен обширный вычислительный эксперимент по окрашиванию упорядоченных множеств различной структуры. Он показал, что лучшие результаты дает критерий Гурвица с коэффициентом доверия $\frac{2}{3}$ и Байеса – Лапласа. Эти критерии позволяют окрасить упорядоченное множество за меньшее число ходов (проверок).

Рассмотрим другую информационную ситуацию ЛПР в игре $\Gamma(GS)$.

Игра $\Gamma(GS)$ в условиях риска

Пусть для каждого хода ЛПР известны вероятности ответов природы. Получить точные значения этих вероятностей не представляется возможным. Воспользуемся приближенной оценкой данных величин.

Увеличение числа деталей в собранном фрагменте в общем случае влечет за собой усложнение геометрии и рост числа потенциальных геометрических препятствий для монтажа других деталей. Это значит, что вероятность окраски в черный цвет растет с увеличением мощности левой части геометрической ситуации. Чем больше это число, тем выше находится соответствующая вершина в упорядоченном множестве GS .

Обозначим: $P_A(B)$ — вероятность события «вершина $A \in GS$ черная», $P_A(W)$ — «вершина A белая». Очевидно, что эти события образуют полную группу, то есть $P_A(B) + P_A(W) = 1$.

Пусть $a = \min_{(A, x) \in GS(x)} \{|A|\}$ — минимальная мощность левых частей всех геометрических ситуаций упорядоченного множества $GS(x)$. Тогда для оценки вероятности можно воспользоваться формулой $P_A(W) = \left(\frac{a}{|A|}\right)^k$. Здесь $k > 0$ — масштабирующий коэффициент, который позволяет настраивать скорость изменения вероятности. При помощи настройки данного коэффициента можно получить распределение вероятностей на вершинах упорядоченного множества GS , которое достоверно описывает реальную проектную ситуацию.

Полагаем, что у изделия существует хотя бы одна последовательность сборки, свободная от геометрических препятствий. Это значит, что для любой детали $x \in X$ существует разрешенная ситуация (B, x) , которая в игре $\Gamma(GS)$ окрашивается в белый цвет. Это значит, что для нее и всех ситуаций (A, x) таких, что $(A, x) \leq (B, x)$, вероятность $P_A(W) = 1$. Легко видеть, что предложенная формула расчета априорных вероятностей удовлетворяет данному условию, то есть $P_A(W) = \left(\frac{a}{|A_{\min}|}\right)^k = \left(\frac{a}{a}\right)^k = 1$.

На рис. 7 показана платежная матрица игры $\Gamma(GS)$ в условиях риска. Последняя строка матрицы содержит вероятности окраски вершин X^j , $j = \overline{1, n}$, в белый цвет $P_j(W)$. Очевидно, что $P_j(B) = 1 - P_j(W)$.

Чистые стратегии для игры $\Gamma(GS)$ в условиях риска

Все стратегии разыгрывания многошаговых неантагонистических игр можно разделить на чистые, смешанные и рандомизированные. В чистых стратегиях на каждом шаге игры ЛПР использует тот критерий, который был выбран априори. Стратегия называется смешанной, если

	X	X^1	X^2	$\dots$	X^n
Y	$Y_1 = \text{черный}$	e_{11}	e_{12}	$\dots$	e_{1n}
	$Y_2 = \text{белый}$	e_{21}	e_{22}	$\dots$	e_{2n}
P		$P_1(W)$	$P_2(W)$	$\dots$	$P_n(W)$

Рис. 7. Платежная матрица игры $\Gamma(GS)$ в условиях риска. В этой матрице X и Y — первый (ЛПР) и второй (природа) игроки. X^j — ходы ЛПР, Y_i — ответы природы. e_{ij} — выигрыш ЛПР при выборе хода X^j и ответе природы Y_i . $P_j(W)$ — вероятность того, что вершина упорядоченного множества, выбранная ЛПР, будет окрашена природой в белый цвет

в процессе игры ЛПР меняет критерий выбора лучшего хода. Игровая стратегия называется рандомизированной, если для выбора хода используется некоторый случайный механизм. То есть на каждом шаге выбирается ход в соответствии с некоторым заданным законом распределения вероятностей [Рыков, 2009].

На каждом шаге любой многошаговой игры смешанные и рандомизированные стратегии используют одну из чистых стратегий, которые применяются по выбору ЛПР или согласно заданному случайному закону. Поэтому чистые стратегии представляют собой элементный базис для синтеза различных комбинированных стратегий.

Рассмотрим основные чистые стратегии, которые можно применить для $\Gamma(GS)$ в общем случае, то есть когда на структуру упорядоченного множества GS не накладывается никаких ограничений, кроме требования связности. Введем короткое обозначение: $P(W) = P$.

Критерий Байеса (максимума ожидаемой полезности) заключается в максимизации математического ожидания выигрыша ЛПР [Рыков, 2009]. Для $\Gamma(GS)$ он представляется в виде $\max_j (e_{1j}P_j(B) + e_{2j}P_j(W))$. Поскольку $P(B) = 1 - P(W)$, получим

$$z_1 = \max_j (e_{1j} + (e_{2j} - e_{1j})P_j).$$

Критерий Гермейера максимизирует математическое ожидание худшего ответа природы на j -й ход ЛПР [Рыков, 2009]. Для $\Gamma(GS)$ этот критерий принимает вид

$$z_2 = \max_j E_j, \quad E_j = \min_j (e_{1j}(1 - P) + e_{2j}P).$$

Критерий наиболее вероятного состояния природы z_3 (модальный критерий) [Рыков, 2009]. Выбирается самый вероятный ответ природы. Полагается, что он обязательно произойдет, и далее ЗПР решается как полностью определенная. То есть выбирается вершина с максимальным выигрышем ЛПР. Для игры $\Gamma(GS)$ этот критерий имеет смысл для неокрашенных вершин, расположенных на удалении от центра упорядоченного множества GS .

Критерий Ходжа – Лемана. Это синтетический критерий, он основан на композиции критериев Байеса и Вальда [Рыков, 2009]. Для $\Gamma(GS)$ его можно записать в виде

$$z_4 = \max_j (\alpha \min(e_{1j}, e_{2j}) + (1 - \alpha)(e_{1j}P(B) + e_{2j}P(W))),$$

где $\alpha \in [0, 1]$ — так называемый коэффициент доверия. Когда он равен единице, то данный критерий совпадает с критерием Вальда, при $\alpha = 0$ получим критерий Байеса.

Критерий максимизации вероятности распределения [Рыков, 2009]. Обозначим: $\underline{\lambda} = \min_j \min(e_{1j}, e_{2j})$ и $\bar{\lambda} = \max_j \max(e_{1j}, e_{2j})$. Выберем некоторое пороговое значение: $\underline{\lambda} \leq \lambda \leq \bar{\lambda}$.

Согласно данному критерию лучшим считается ход ЛПР, у которого максимальная вероятность события «выигрыш ЛПР больше или равен λ ». Для $\Gamma(GS)$ критерий записывается в виде

$$z_5 = \max_j R_j, \quad R_j = \begin{cases} 0, & e_{1j}, e_{2j} < \lambda, \\ 1, & e_{1j}, e_{2j} \geq \lambda, \\ P_j, & e_{1j} < \lambda, e_{2j} \geq \lambda, \\ 1 - P_j, & e_{1j} \geq \lambda, e_{2j} < \lambda. \end{cases}$$

Критерий минимума среднего квадратичного отклонения [Рыков, 2009]. Для каждого хода ЛПР рассчитываются математическое ожидание выигрыша и значение среднего квадратичного отклонения. Лучшим считается такой ход, у которого величина отклонения минимальна. Для $\Gamma(GS)$ данный критерий записывается в виде

$$z_6 = \min_j \sqrt{(e_{1j} - M_j)^2 P(B) + (e_{2j} - M_j)^2 P(W)},$$

M_j — математическое ожидание выигрыша ЛПР при выборе хода X^j . Поскольку $P(B) = 1 - P$, то $M_j = e_{1j}(1 - P) + e_{2j}P$. После элементарных алгебраических преобразований критерий можно записать следующим образом:

$$z_6 = \min_j |e_{2j} - e_{1j}| \sqrt{P - P^2}.$$

Часто в различных задачах принятия решений распределение вероятностей ответов природы получено не на основе достоверной статистики, а задается эмпирически. В подобных информационных ситуациях нашли применение различные синтетические критерии, использование которых позволяет до некоторой степени компенсировать неточность исходных данных. Рассмотрим один из таких критериев применительно к игре $\Gamma(GS)$.

Синтетический критерий. Обозначим: $e_k = \max_j \min(e_{1j}, e_{2j})$. Введем некоторое пороговое значение: $\delta > 0$. Обозначим через J_1 множество номеров столбцов (рис. 6), для которых выполняется $J_1 = \{j \mid (e_k - \min(e_{1j}, e_{2j})) \leq \delta\}$. Обозначим через J_2 множество номеров столбцов, для которых выполняется $J_2 = \{j \mid (\max(e_{1j}, e_{2j}) - \max(e_{1k}, e_{2k})) \geq \delta\}$. Рассмотрим множество номеров $J = J_1 \cap J_2$. В столбцах с номерами из этого множества проигрыш ЛПР гарантированно меньше, чем значение выбранного порога, а выигрыш больше δ . Критерий

$$z_7 = \max_{j \in J} (e_{1j}(1 - P) + e_{2j}P)$$

из всех столбцов множества J выбирает столбец с максимальным математическим ожиданием выигрыша ЛПР.

В игре $\Gamma(GS)$ выбор хода зависит от многочисленных структурных и числовых характеристик упорядоченного множества GS . К числу таких характеристик относятся: высота упорядоченного множества, его ширина, связность, мера линейности, мощность максимальной антицепи, наличие максимального или минимального элементов в GS и многое другое. Все это делает задачу поиска рациональной смешанной или рандомизированной стратегий для $\Gamma(GS)$ очень трудной.

Эвристики для игры $\Gamma(GS)$

Линейная эвристика. Легко видеть, что в неупорядоченном множестве (антицепи) невозможно использовать утверждения о геометрической наследственности. Окрашивание такого множества требует n ходов, где n — число элементов множества. И наоборот, любую n -элементную цепь (упорядоченное множество без несравнимых элементов) можно окрасить за не более чем $(1 + n)(k + 2) - 2^{k+1}$, где $k = \lceil \log_2 n \rceil$ (целая часть от $\log_2 n$), ходов [Божко, 2018].

Обобщим это утверждение на произвольные упорядоченные множества. Можно полагать, что чем выше линейность упорядоченного множества, тем ближе его структура к цепи, тем меньше ходов потребуется ЛПР для его окраски.

Это предположение строго не доказано, но, как и любое хорошее эвристическое правило, согласуется с интуицией и подтверждается большим числом примеров. Точным показателем линейности упорядоченного множества GS служит число всех линейных продолжений $l(GS)$ этого множества. Для антицепи $l(GS) = n!$, для цепи $l(GS) = 1$.

Рассмотрим простой пример, показанный на рис. 8. Это упорядоченное множество состоит из n -элементной цепи C_n и одной вершины.

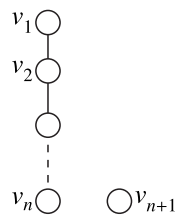


Рис. 8. Простое упорядоченное множество

На очередном шаге ЛПР может выбрать любую из $n + 1$ неокрашенных вершин. Чтобы избежать громоздких вычислений, рассмотрим два варианта и оценим их по наихудшему исходу. Если выбрать вершину v_{n+1} , то $l(C_n) = 1$ и в наихудшем случае для окрашивания цепи потребуется n проверок. Если выбирается вершина $v_1(v_n)$, то $l(C_{n-1} \cup \{v_{n+1}\}) = n$ и для окрашивания этого упорядоченного множества потребуется $2(n - 1)$ проверок.

Линейную эвристику можно использовать как дополнительный критерий в случае, когда рассмотренные решающие правила выбирают для проверки несколько неокрашенных вершин. Рассмотрим пример, показанный на рис. 9. Пусть выбрана чистая стратегия ЛПР, основанная на использовании критерия Вальда.

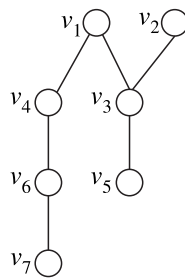


Рис. 9. Упорядоченное множество GS_1 с неокрашенными вершинами

Платежная матрица игры $\Gamma(GS_1)$ перед первым ходом ЛПР приведена в табл. 1.

Таблица 1. Платежная матрица игры $\Gamma(GS_1)$ перед первым ходом ЛПР. Заголовки столбцов — это вершины упорядоченного множества GS_1 . Цифры в ячейках матрицы означают мощности верхнего (черный цвет) и нижнего (белый цвет) конусов соответствующей вершины в упорядоченном множестве GS_1

	v_1	v_2	v_3	v_4	v_5	v_6	v_7
Черный	1	1	3	2	4	3	4
Белый	6	3	2	3	1	2	1

По критерию Вальда, оптимальным выбором ЛПР будут вершины v_3 , v_4 или v_5 . На рис. 10 показаны все варианты упорядоченных множеств, которые получаются после исключения из GS_1 окрашенных вершин.

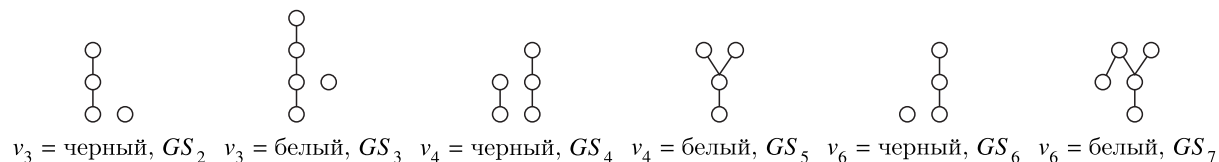


Рис. 10. Варианты игры $\Gamma(GS_1)$ после всех возможных ответов природы на первый ход ЛПР. После каждого хода ЛПР и ответа природы упорядоченное множество GS_1 распадается на два несвязных фрагмента, которые далее окрашиваются независимо друг от друга

Подсчитаем значения показателя $l()$ для всех упорядоченных множеств, показанных на рис. 10: $l(GS_2) = 4$, $l(GS_3) = 5$, $l(GS_4) = 10$, $l(GS_5) = 2$, $l(GS_6) = 4$, $l(GS_7) = 10$. Легко видеть, что выбор хода v_3 порождает упорядоченное множество с наименьшей мерой линейности, равной в сумме 9. Для вершины v_6 сумма линейных продолжений составляет 14.

Легко видеть, что $GS_3 = GS_7$. Подсчитаем число правильных окрасок для GS_3 и GS_7 . Обозначим это число $m()$: $m(GS_3) = 5$, а $m(GS_7) = 10$.

На рис. 11 показаны все правильные окраски упорядоченного множества GS_7 в два цвета.

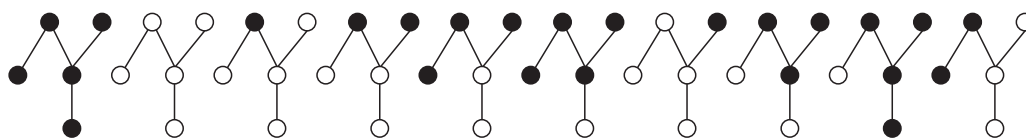


Рис. 11. Множество всех правильных окрасок упорядоченного множества GS_7 в два цвета

В общем случае вычисление числа линейных продолжений $l(GS)$ упорядоченного множества GS требует значительных вычислительных ресурсов. В качестве меры линейности можно использовать различные приближенные оценки этого числа, например: мощность максимальной антицепи, число упорядоченных пар и др.

Эвристика максимальной цепи. Часто в инженерной практике генерация всех допустимых альтернатив связана с очень большими затратами ресурсов или невозможна по техническим причинам. Это типичная проектная ситуация для автоматизированного проектирования последовательности сборки. Эвристика максимальной цепи позволяет получить большой объем геометрической информации при умеренных вычислительных затратах.

В упорядоченном множестве GS находится самая длинная цепь и окрашивается за не более чем $(1 + n)(k + 2) - 2^{k+1}$, где $k = \lfloor \log_2 n \rfloor$ (целая часть от $\log_2 n$), ходов. По правилам игры $\Gamma(GS)$ цвет вершин цепи распространяется на их верхние и нижние конусы, и процедура повторяется для неокрашенной части упорядоченного множества GS .

Заключение

Автоматизированное проектирование процессов сборки/разборки сложных изделий — это важная проблема современной информатики и теории проектирования. Последовательность и содержание сборочных операций в значительной степени зависят от геометрических свойств изделия. Приведен обзор методов моделирования геометрических препятствий, которые применяются в современных системах автоматизированного проектирования и управления. Анализ показал, что эти подходы не позволяют корректно поставить задачу минимизации числа необходимых

геометрических проверок при синтезе последовательности сборки/разборки сложного изделия. Введено важное понятие геометрической ситуации. Сформулированы два утверждения о геометрической наследственности. Задача минимизации числа геометрических проверок поставлена как неантагонистическая игра ЛПР с природой. В этой игре необходимо окрасить упорядоченное множество всех геометрических ситуаций в два цвета за наименьшее число ходов. Рациональная стратегия окрашивания позволяет минимизировать число проверок на свободу от геометрических препятствий при монтаже деталей и сборочных единиц. Рассмотрены чистые стратегии ЛПР в ситуации риска, когда известны вероятности ответов природы. Предложены два эвристических правила, которые могут быть использованы для рационального разыгрывания игры. Для выбора рациональной стратегии в игре $\Gamma(GS)$ необходимо выполнить вычислительный эксперимент по окраске упорядоченных множеств сходной структуры в два цвета. Авторы планируют посвятить этой теме отдельную статью.

Список литературы (References)

- Божко А. Н. Анализ геометрической разрешимости при сборке сложных изделий как задача принятия решений // Математика и математическое моделирование. — 2018. — № 5. — С. 17–34.
Bozhko A. N. Analiz geometricheskoy razreshimosti pri sborke slozhnyh izdelij kak zadacha prinyatiya reshenij [Analysis of geometric reasoning in the assembly of complex products as a decision-making task] // *Matematika i matematicheskoe modelirovanie*. — 2018. — No. 5. — P. 17–34 (in Russian).
- Божко А. Н. Игровое моделирование геометрического доступа // Наука и образование. МГТУ им. Н. Э. Баумана. Электрон. журн. — 2009. — Эл № ФС 77-48211. — № 12. — <https://cyberleninka.ru/article/n/igrovoe-modelirovanie-geometricheskogo-dostupa/viewer>
Bozhko A. N. Igrovoe modelirovanie geometricheskogo dostupa [Game-theoretic modeling of geometric reasoning] // *Nauka i obrazovanie. MG TU im. N. E. Bauman. Elektron. Journal*. — 2009. — EL No. FS 77-48211. — No. 12. — <https://cyberleninka.ru/article/n/igrovoe-modelirovanie-geometricheskogo-dostupa/viewer> (in Russian).
- Божко А. Н., Родионов С. В. Комбинаторные методы геометрической разрешимости в автоматизированных системах проектирования. Обзор // Информационные технологии. — 2022. — Т. 28, № 3. — С. 115–125.
Bozhko A., Rodionov S. Kombinatornye metody geometricheskoy razreshimosti v avtomatizirovannykh sistemah proektirovaniya. Obzor [Combinatorial methods of geometric reasoning in computer-aided design systems. Review] // *Informacionnye tekhnologii*. — 2022. — Vol. 28, No. 3. — P. 115–125 (in Russian).
- Рыков А. С. Системный анализ: модели и методы принятия решений и поисковой оптимизации. — М.: Издательский дом МИСиС, 2009. — 608 с.
Rykov A. S. Sistemnyj analiz: modeli i metody prinyatiya reshenij i poiskovoj optimizacii [System analysis: models and methods of decision-making and search engine optimization]. — Moscow: Izdatel'skij dom MISiS, 2009. — 608 p. (in Russian).
- Bozhko A. N. Hypergraph model for assembly sequence problem // IOP Conference Series: Materials Science and Engineering. IOP Publishing. — 2019. — Vol. 560, No. 1. — P. 012010.
- Bozhko A. N. Mathematical modelling of mechanical structures and assembly processes of complex technical systems // International Russian Automation Conference. — 2021. — P. 80–91.
- Eng T.-H., Ling Z.-K., Olson W., Mclean Ch. Feature-based assembly modeling and sequence generation // Computers & Industrial Engineering. — 1999. — Vol. 36, No. 1. — P. 17–33.
- Ghandi S., Masehian E. Review and taxonomies of assembly and disassembly path planning problems and approaches // Computer-Aided Design. — 2015. — Vol. 67–68. — P. 58–86.
- González D. et al. A review of motion planning techniques for automated vehicles // IEEE Transactions on Intelligent Transportation Systems. — 2015. — Vol. 17, No. 4. — P. 1135–1145.
- Halperin D., Latombe J.-C., Wilson R. H. A. General framework for assembly planning: the motion space approach // Algorithmica. — 2000. — Vol. 26, No. 3–4. — P. 577–601.
- Hoffman R. A common sense approach to assembly sequence planning // Computer-Aided Mechanical Assembly Planning. — 1991. — Vol. 148. — P. 289–313.
- Jiménez P., Thomas F., Torras C. 3D collision detection: a survey // Computers & Graphics. — 2001. — Vol. 25, No. 2. — P. 269–285.

- Krishnan S., Sanderson A.* Reasoning about geometric constraints for assembly sequence planning // *Robotics and Automation*, 1991. Proceedings. — 1991. — Vol. 1. — P. 776–782.
- Miller J., Hofman R.* Automatic assembly planning with fasteners // *Robotics and Automation. Proceedings. 1989 IEEE International Conference.* — 1989. — Vol. 1. — P. 69–74.
- Pan Ch., Smith Sh., Smith G.* Determining interference between parts in CAD STEP files for automatic assembly planning // *Journal of Computing and Information Science in Engineering.* — 2005. — Vol. 5, No. 1. — P. 56–62.
- Roman S.* Lattices and ordered sets. — Springer, 2008. — 307 p.
- Romney B., Godard C., Goldwasser M., Ramkumar G.* An efficient system for geometric assembly sequence generation and evaluation // *International Design Engineering Technical Conferences and Computers and Information in Engineering Conference.* — 1995. — Vol. 17018. — P. 699–712.
- Schenk M., Straßburger S., Kießner H.* Combining virtual reality and assembly simulation for production planning and worker qualification // *Proc. of International Conference on Changeable, Agile, Reconfigurable and Virtual Production.* — 2005.
- Seth A., Vance J.M., Oliver J.H.* Virtual reality for assembly methods prototyping: a review // *Virtual reality.* — 2011. — Vol. 15, No. 1. — P. 5–20.
- Srinivasan H., Gadh R.* A non-interfering selective disassembly sequence for components with geometric constraints // *IIE Transactions.* — 2002. — Vol. 34, No. 4. — P. 349–361.
- Su Q.* A hierarchical approach on assembly sequence planning and optimal sequences analyzing // *Robotics and Computer-Integrated Manufacturing.* — 2009. — Vol. 25, No. 1. — P. 224–234.
- Weiwei W., Kensuke H., Kazuyuki N.* Assembly sequence planning for motion planning // *Assembly Automation.* — 2018. — Vol. 38, No. 2. — P. 195–206.
- Wilson R.* On geometric assembly planning. — PhD thesis. — Stanford: Stanford Univ., Dept. Comput. Sci., 1992. — 156 p.
- Wilson R., Latombe J.-C.* Geometric reasoning about mechanical assembly // *Artificial Intelligence.* — 1994. — Vol. 71, No. 2. — P. 371–396.
- Woo T., Dutta D.* Automatic disassembly and total ordering in three dimension // *Journal of Engineering for Industry.* — 1991. — Vol. 113, No. 2. — P. 207–213.
- Yin Z.P., Ding H., Xiong Y.L.* A virtual prototyping approach to generation and evaluation of mechanical assembly sequences // *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part B: Journal of Engineering Manufacture.* — 2004. — Vol. 218, No. 1. — P. 87–102.

UDC: 51

Noise removal from images using the proposed three-term conjugate gradient algorithm

H. M. Khudhur^{1,a}, I. H. Halil^{2,b}

¹Mathematics Department, College of Computer Science and Mathematics, University of Mosul,
Mosul, Iraq

²Department of Mathematics, College of Science, University of Kirkuk,
Kirkuk, Iraq

E-mail: ^a hisham892020@uomosul.edu.iq, ^b isam.h.halil@uokirkuk.edu.iq

Received 10.09.2023, after completion — 14.05.2024.

Accepted for publication 16.07.2024.

Conjugate gradient algorithms represent an important class of unconstrained optimization algorithms with strong local and global convergence properties and simple memory requirements. These algorithms have advantages that place them between the steep regression method and Newton's algorithm because they require calculating the first derivatives only and do not require calculating and storing the second derivatives that Newton's algorithm needs. They are also faster than the steep descent algorithm, meaning that they have overcome the slow convergence of this algorithm, and it does not need to calculate the Hessian matrix or any of its approximations, so it is widely used in optimization applications. This study proposes a novel method for image restoration by fusing the convex combination method with the hybrid (CG) method to create a hybrid three-term (CG) algorithm. Combining the features of both the Fletcher and Reeves (FR) conjugate parameter and the hybrid Fletcher and Reeves (FR), we get the search direction conjugate parameter. The search direction is the result of concatenating the gradient direction, the previous search direction, and the gradient from the previous iteration. We have shown that the new algorithm possesses the properties of global convergence and descent when using an inexact search line, relying on the standard Wolfe conditions, and using some assumptions. To guarantee the effectiveness of the suggested algorithm and processing image restoration problems. The numerical results of the new algorithm show high efficiency and accuracy in image restoration and speed of convergence when used in image restoration problems compared to Fletcher and Reeves (FR) and three-term Fletcher and Reeves (TTFR).

Keywords: nonsmooth, restoration, globally, descent, numerical, optimization

Citation: *Computer Research and Modeling*, 2024, vol. 16, no. 4, pp. 841–853.

УДК: 51

Удаление шума из изображений с использованием предлагаемого алгоритма трехчленного сопряженного градиента

Х. М. Худхур^{1,a}, И. Х. Халил^{2,b}

¹Математический факультет, Колледж компьютерных наук и математики, Университет Мосула, Мосул, Ирак

²Кафедра математики, Колледж науки, Университет Киркука, Киркук, Ирак

E-mail: ^a hisham892020@uomosul.edu.iq, ^b isam.h.halil@uokirkuk.edu.iq

Получено 10.09.2023, после доработки — 14.05.2024.

Принято к публикации 16.07.2024.

Алгоритмы сопряженных градиентов представляют собой важный класс алгоритмов безусловной оптимизации с хорошей локальной и глобальной сходимостью и скромными требованиями к памяти. Они занимают промежуточное место между методом наискорейшего спуска и методом Ньютона, поскольку требуют вычисления и хранения только первых производных и как правило быстрее методов наискорейшего спуска. В данном исследовании рассмотрен новый подход в задаче восстановления изображений. Он наследует одновременно методу сопряженных градиентов Флетчера–Ривза (FR) и трехкомпонентному методу сопряженных градиентов (TTSG), и поэтому назван авторами гибридным трехкомпонентным методом сопряженных градиентов (HYCGM). Новое направление спуска в нем учитывает текущее направления градиента, предыдущее направления спуска и градиент из предыдущей итерации. Показано, что новый алгоритм обладает свойствами глобальной сходимости и монотонности при использовании неточного линейного поиска типа Вулфа при некоторых стандартных предположениях. Для подтверждения эффективности предложенного алгоритма приводятся результаты численных экспериментов предложенного метода в сравнении с классическим методом Флетчера–Ривза (FR) и трехкомпонентным методом Флетчера–Ривза (TTFR).

Ключевые слова: негладкий, восстановление, глобально, спуск, числовой, оптимизация

1. Introduction

Optimization problems are notoriously difficult because of their nonsmooth nature. Restoring images that were damaged by background noise while being sent or recorded is one such issue. Most gradient-based methods are not suitable for solving these problems directly because of their structure. Recent developments in gradient-based techniques have made it possible to employ more effective and trustworthy noise suppression processes, leading to more precise outcomes. Impulse noise has been proposed as a classical noise model by a number of academics. How well different gradient-based techniques perform when used to image restoration problems has been the subject of recent research (for examples, see [Aminifard, Babaie-Kafaki, 2022; Babaie-Kafaki, Mirhoseini, Aminifard, 2023; Khudhur, Fawze, 2023; Laylani et al., 2023]).

To do so, let's first look at the noise candidate's index set, which is as follows:

$$K = \{(i, j) \in W \mid \bar{\xi}_{ij} \neq \xi_{ij}, \xi_{ij} = s_{\min} \text{ or } s_{\max}\}, \quad (1)$$

where $W = \{1, 2, \dots, M\} \times \{1, 2, \dots, N\}$ and is an adaptive median filter of the observed noisy picture of x corrupted by salt and pepper impulse noise, $x_{i,j}$ represents the grey level of the real image x at the pixel location (i, j) . Additionally, a noisy pixel's minimum and maximum values are denoted by $s_{\min}$ and $s_{\max}$. In light of the foregoing, we give the following definition of the picture restoration problem:

$$\min \mathcal{G}(u), \quad (2)$$

where

$$\mathcal{G}(u) = \sum_{(i,j) \in K} \left\{ \sum_{(m,n) \in V_{i,j}/K} \phi_{\alpha}(u_{i,j} - \xi_{m,n}) + \frac{1}{2} \sum_{(m,n) \in V_{i,j}, K} \phi_{\alpha}(u_{i,j} - u_{m,n}) \right\}, \quad (3)$$

where $V_{i,j} = \{(i, j-1), (i, j+1), (i-1, j), (i+1, j)\}$ is the neighborhood of (i, j) . In the following equation, $\phi_{\alpha}(t) = \sqrt{t^2 + \alpha}$ with $\alpha = 1$, represents the Huber function, and it is clear that this function is responsible for the regularity of $\mathcal{G}$. The Huber function is chosen because it preserves edges.

The following unconstrained optimization problem is addressed in this work using conjugate gradient methods:

$$\min(\mathcal{G}(u)), \quad x \in \mathbb{R}^n \quad (4)$$

is frequently taken into account, when the smooth function $\mathcal{G}: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ has gradient $g(x) = \nabla \mathcal{G}(x)$ which is attainable. The optimization community paid close attention to problems in the form of (4) due to their numerous applications in a number of domains [Dai, Zhu, Zhang, 2022; Hassan, Sadiq, 2022; Laylani, Hassan, Khudhur, 2022], including picture restoration [Hassan, Alashoor, 2023; Ismail Ibrahim, Mohammed Khudhur, 2022; Jiang et al., 2023; Wang, Tian, Pang, 2023]. Iterative techniques that utilize the gradient of $\mathcal{G}$ are typically the most efficient way to deal with such problems.

Due to its nice theoretical property and low memory requirements, the Conjugate Gradient (CG) method is an example of such a technique. By utilizing $x_0 \in \mathbb{R}^n$ as a starting point, the approach constructs the sequence $\{x_k\}$ according to the scheme

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k, \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (5)$$

Step size, often known as line step, is denoted by the scalar $\alpha_k > 0$.

The Wolfe rule [Powell, 1970] is a common method for calculating the step size. In the k th iteration method, α_k is calculated to adhere to a set of predetermined constraints [Hager, Zhang,

2006; Elhamid, Khudhur, 2024; Souli et al., 2024]. The following inequalities characterize the widely employed method known as the standard line search approach:

$$\mathcal{G}(x_k + \alpha_k d_k) \leq \mathcal{G}(x_k) + \delta \alpha_k g_k^T d_k \quad (6)$$

$$d_k^T g(x_k + \alpha_k d_k) \geq \sigma d_k^T g_k. \quad (7)$$

Replacing (7) with the formula

$$|d_k^T g(x_k + \alpha_k d_k)| \leq -\sigma d_k^T g_k \quad (8)$$

provides the rule where $0 < \delta < \sigma < 1$ known as strong Wolfe condition. The spectral search direction, d_{k+1} , is used to determine this step size, which is then expressed as

$$d_{k+1} = \begin{cases} -g_{k+1} & \text{if } k = 0, \\ -g_{k+1} + \beta_k d_k & \text{if } k > 0, \end{cases} \quad (9)$$

where β_k stands for the CG updating parameters. The parameter β_k plays a significant role in developing and selecting a CG approach. Fletcher and Reeves (FR) [Fletcher, 1964] and Polak, Ribière, and Polyak (PRP) [Polak, Ribière, 1969] suggest some antecedent formulations for the parameters with the following formulas:

$$\beta_k^{\text{FR}} = \frac{\|g_{k+1}\|^2}{\|g_k\|^2}, \quad \beta_k^{\text{PRP}} = \frac{g_{k+1}^T y_k}{\|g_k\|^2}$$

with $y_k = g_{k+1} - g_k$ and $\|\cdot\|$ stands for the Euclidean norm of vectors.

In addition to these, there are also the methods of Conjugate Descent (CD) [Fletcher, 1980], Hestenes and Stiefel (HS) [Hestenes, Stiefel, 1952], Liu and Storey (LS) [Liu, Storey, 1991], Dai and Yuan (DY), and so on. Recently, three-term conjugate gradient methods were introduced by Zhang, Zhou, and Li [Zhang, Zhou, Li, 2006a; Zhang, Zhou, Li, 2006b; Zhang, Zhou, Li, 2007]. These methods always fulfill the sufficient descent criterion:

$$g_k^T d_k \leq -k \|g_k\|^2 \quad \forall k \quad (10)$$

for some positive constant k , apart from line-of-sight considerations. They presented the modified FR approach, which is outlined in [Zhang, Zhou, Li, 2006a]:

$$d_k = -g_k + \beta^{\text{FR}} d_{k-1} - \theta_{k-1}^{(1)} g_k, \quad (11)$$

where

$$\theta_{k-1}^{(1)} = \frac{d_{k-1}^T g_k}{g_{k-1}^T g_{k-1}}.$$

Since this search direction satisfies $d_k^T g_k = \|g_k\|^2$ for all k .

In addition, they put forth the modified PR approach [Zhang, Zhou, Li, 2006b] and the modified HS approach [Zhang, Zhou, Li, 2007], which are defined as

$$d_k = -g_k + \beta^{\text{PRP}} d_{k-1} - \theta_{k-1}^{(1)} y_{k-1}, \quad (12)$$

$$d_k = -g_k + \beta^{\text{HS}} d_{k-1} - \theta_{k-1}^{(1)} y_{k-1}, \quad (13)$$

where

$$\theta_{k-1}^{(2)} = \frac{d_k^T g_k}{g_{k-1}^T g_{k-1}},$$

and

$$\theta_k^{(3)} = \frac{d_{k-1}^T g_k}{d_{k-1}^T y_{k-1}}.$$

The global convergence features of their line searches were demonstrated. This implies the sufficient descent requirement for $k = 1$, and we notice that these procedures always meet $d_{k-1}^T g_{k-1} = -\|g_{k-1}\|^2 < 0$ for every k .

We will mention here the contributions we made in this paper as follows:

1. To counteract the slowness of the FR and TTFR approaches, we propose using a hybrid CG parameter derived from convex combinations in the search direction of a three-term conjugate gradient.
2. The derivation of a new value for using the pure conjugate condition to speed up the new proposed method.
3. Improve the numerical results with the proposed new method by finding a new value that satisfies the pure conjugate criterion.
4. Under certain hypotheses, the new proposed approach would be convergent both locally and globally.
5. We use the new proposed method in image restoration to demonstrate its efficiency compared to other methods in the same field.

This paper follows the following structure: Section 1 includes a general introduction to the image restoration and noise removal algorithms. With a general introduction to numerical optimization and some classical conjugate gradient algorithms. In Section 2, a completely new three-term gradient conjugate algorithm is introduced. In Section 3, we study the descent property of the new algorithm. In Section 4, we study global convergence results using a standard Wolfe line search. In Section 5, we examine the numerical results and comparisons we used to solve the image restoration problems. In Section 6, the concluding section, we present the conclusions we reached in the paper.

2. New three-term conjugate gradient algorithm

In this research, we focus on developing effective algorithms for large-scale unconstrained optimization and picture restoration issues by making greater use of the information of the objective function at the present iteration. Taking inspiration from the research presented in [Jiang et al., 2022; Liu, Zhao, Wu, 2020; Narushima, Yabe, Ford, 2011], the convex combination method utilized in [Yuan, Li, Hu, 2020], and the hybrid CGM proposed in [Fletcher, 1964], we provide a novel family of hybrid TTCGMs with the following search strategy:

$$d_k = \begin{cases} -g_k, & \text{if } k = 0, \\ -g_k + (1 - \lambda_k)\beta_k^{\text{HYCGM}}d_{k-1} + \eta_k\lambda_k\theta_k g_{k-1}, & \text{if } k \geq 1, \end{cases} \quad (14)$$

$$\beta_k^{\text{HYCGM}} = \max\{0, \min\{\beta_k^{\text{HA}}, \beta_k^{\text{FR}}\}\}, \quad \theta_k = \vartheta \frac{g_k^T g_{k-1}}{\|g_{k-1}\|^2}, \quad (15)$$

where $0 < \vartheta < 1$,

$$\beta^{\text{HA}} = \frac{\theta_k \|g_{k+1}\|^2 + (1 - \theta_k) \|g_{k+1}\|_F^2}{g_k^T g_k},$$

where $\|\cdot\|_F^2$ is the Frobenius norm of an m -by- n matrix:

$$\|X\|_F = \sqrt{\sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n |a_{ij}|^2} = \sqrt{\text{trace}(X^T X)}.$$

Using the pure conjugacy condition [Dai, 2001; Li, Tang, Wei, 2007], we find a new value for λ_k :

$$\begin{aligned} -y_k^T g_{k+1} + (1 - \lambda_k) \beta_k^{\text{HYCGM}} y_k^T d_k + \lambda_k \theta_k y_k^T g_{k+1} &= 0, \\ \lambda_k &= \frac{y_k^T g_{k+1} - \beta_k^{\text{HYCGM}} y_k^T d_k}{\theta_k y_k^T g_{k+1} - \beta_k^{\text{HYCGM}} y_k^T d_k}. \end{aligned}$$

Also, from using the pure conjugacy condition [Dai, 2001; Li, Tang, Wei, 2007], we find a new value for η_k :

$$\begin{aligned} -y_k^T g_{k+1} + (1 - \lambda_k) \beta_k^{\text{HYCGM}} y_k^T d_k + \eta_k \lambda_k \theta_k y_k^T g_{k+1} &= 0, \\ \eta_k &= \frac{y_k^T g_{k+1} - (1 - \lambda_k) \beta_k^{\text{HYCGM}} y_k^T d_k}{\theta_k \lambda_k y_k^T g_{k+1}}, \end{aligned}$$

where β_k^{HYCGM} is any conjugate parameter and $0 < \vartheta < 1$.

In the upcoming analysis (see Lemma 1 and the theorem below), it is important to note that the descent property for the search direction defined in (14) and the global convergence of the proposed technique are unaffected by the selection of β_k^{HYCGM} and line searches. More theoretical and practical leeway will be possible as a result of these truths.

Using equation (15) and the weak Wolfe line search (6), and (7), we now officially present the method's steps (HYCGM).

Algorithm HYCGM

Step 0 (initialization). Given an initial point $x_1 \in R^n$, parameters $0 < \vartheta < 1$, $0 < \delta < \sigma < 1$ and $\varepsilon > 0$. Set $d_1 = -g_1$ and $k = 1$.

Step 1. If $\|g_k\| \leq \varepsilon$, stop.

Step 2. Find a step size α_k using the weak Wolfe line search (equations (6) and (7)).

Step 3. Generate the next iteration by $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$.

Step 4. Choose an appropriate conjugate parameter β_k for β_k^{HYCGM} in the recurrence relation (15), and then compute d_k by (14).

Step 5. Start with Step 1 and $k = k + 1$.

3. Descent property

Here, we first examine how HYCGM's search direction generates a descent property. Then, we move on to demonstrating its universal convergence.

An estimation of $(1 - \lambda_k) \beta_k^{\text{HYCGM}}$ is provided, which is necessary for the convergence analysis that follows, and the following lemma demonstrates that d_{k+1} described in (14) is a descent direction.

Lemma 1. *Let $\{d_k\}$ be a HYCGM-generated sequence; then the following holds:*

$$g_k^T d_{k+1} < 0, \quad k \geq 1, \quad (16)$$

which means that the descending search direction is what HYCGM returns. Furthermore, for all $k \geq 2$, we get

$$0 \leq (1 - \lambda_k) \beta_k^{\text{HYCGM}} \leq \frac{g_k^T d_k}{g_{k-1}^T d_{k-1}}. \quad (17)$$

Proof. This is similar to Jiang proof [Jiang et al., 2022].

4. Global convergence

The following assumptions for the objective function are necessary for analyzing the HYCGM's global convergence property.

A1. $\Lambda = \{x \in R^n \mid \mathcal{G}(x) \leq \mathcal{G}(x_1)\}$ is a bounded level set.

A2. Since $\mathcal{G}(x)$ is differentiable and $g(x)$ is Lipschitz continuous in some region U of, there exists a constant $L > 0$ such that

$$\|g(x) - g(y)\| \leq L\|x - y\|, \quad \forall x, y \in U$$

holds true in this region. Based on the results of the weak Wolfe line search (equations (6) and (7)), we may conclude that the sequence $\{\mathcal{G}(x_k)\}$ is monotonically decreasing. When we add this to assumption A1, we find that $\{x_k\}$ is a finite sequence. This famous Zoutendijk condition is proved by the following lemma. For further information on its significance in the CGM's convergence analysis, see [Zoutendijk, 1970].

Lemma 2. *In this case, we can iterate in the manner (2), where d_{k+1} meets the descent criterion $g_k^T d_{k+1} < 0$ and k satisfies the weak Wolfe line search (6) and (7). Assuming A1 and A2 hold, we get*

$$\sum_{k=1}^{\infty} \frac{(g_k^T d_k)^2}{\|d_k\|^2} < +\infty.$$

Lemmas 1 and 2 allow us to provide a convergence analysis for HYCGM.

Theorem. *Let $\{x_k\}$ denote a sequence produced by HYCGM. Assumptions A1 and A2 imply that $\liminf_{k \rightarrow \infty} \|g_k\| = 0$.*

Proof. This is similar to Jiang's proof [Jiang et al., 2022].

5. Numerical results and compares

Here, we show how well the proposed HYCGM works in restoring the original gray level images (x) of the Camera Man, Lena, Baboon, Barbara, Brain, Man(512), Peppers (256 256), Zainb1, Zainb2, Hisham, and M&M that were distorted by salt-and-pepper impulse noise. For more on this, see [Aji et al., 2022; Hassan Ibrahim et al., 2022; Jiang et al., 2022; Khudhur, Hassan, Aji, 2024; Khudhur, Mohammed, 2024; Souli et al., 2024]. The values of $\delta = 0.01$ and $\sigma = 0.1$ were taken, respectively, based on the strategy in [Sellami, Laskri, Benzine, 2015]. We evaluate the proposed HYCGM against the FR and TTFR approaches using three metrics: the number of iterations (NOI), the amount of processing time (CPUtime), and the maximum signal-to-noise ratio (PSNR). An Intel Core i7 machine with 16 GB of RAM was used to run MATLAB and carry out all of the procedures [Jiang et al., 2022; Khudhur, Hassan, Aji, 2024]. For more information about the source code and images, see the SI file. Images are restored to 30, 50, 70, and 90 percent of their original quality depending on the amount of noise present. The number of iterations Iterations (NOI), central processing unit time (CPUtime), and peak signal-to-noise ratio (PSNR) are three metrics used in this study, and the results shown in Tables 1 show that the suggested method outperformed the other methods investigated. Figures 1–6 further demonstrate that the proposed method outperformed the alternatives in terms of removing noise from the flawed Lena, Brain, Camera man, Peppers, Zainb1, and Hisham images. The outcomes lead us to believe that the suggested HYCGM is useful and appropriate.

Table 1. Comparisons and numerical results of the algorithms (HYCGM, FR, and TTFR)

Problems	Noise Ratio	HYCGM algorithm			FR algorithm			TTFR algorithm		
		NOI	CPU time	PSNR	NOI	CPU time	PSNR	NOI	CPU time	PSNR
lena.png	30 %	15	7.73	37.04	245	74.13	34.22	89	15.8	35.28
lena.png	50 %	21	17.32	34.44	99	54.24	26.24	166	42.77	32.01
lena.png	70 %	22	23.35	31.05	5	14.45	14.19	250	81.92	29.22
lena.png	90 %	30	31.25	26.2	130	117.88	23.43	144	69.55	25.18
brain.bmp	30 %	20	2.31	29.72	75	5.43	24.43	225	7.76	29.07
brain.bmp	50 %	21	3.14	28.15	238	26.98	26.22	204	11.09	27.30
brain.bmp	70 %	23	4.49	25.93	175	25.56	23.98	269	18.76	25.30
brain.bmp	90 %	38	6.74	22.27	5	4.17	8.58	292	24.28	22.02
cameraman.png	30 %	22	2.52	29.61	148	12.08	27.91	115	4.59	29.08
cameraman.png	50 %	21	3.31	27.35	100	10.74	24.62	183	10.22	26.63
cameraman.png	70 %	23	4.84	24.76	5	3.15	13.17	207	14.87	24.22
cameraman.png	90 %	34	6.25	21.19	106	21.01	19.88	148	13.64	20.83
peppers.bmp	30 %	16	2.13	33.13	95	7.66	28.92	104	4.15	32.18
peppers.bmp	50 %	22	4.26	30.37	204	22.39	28.05	165	9.56	29.23
peppers.bmp	70 %	24	4.42	27.08	110	20.27	23.86	221	15.97	26.33
peppers.bmp	90 %	32	6.99	22.74	119	26.92	21.18	145	14.81	22.27
zainbl.jpg	30 %	17	8.51	32.27	166	63.04	28.48	171	29.28	31.69
zainbl.jpg	50 %	22	17.32	30.09	72	43.98	22.99	184	49.95	28.94
zainbl.jpg	70 %	25	22.97	27.45	161	112.93	24.66	273	92.72	26.47
zainbl.jpg	90 %	33	32.61	24.06	196	206.5	22.35	285	129.09	23.54
Hisham.jpg	30 %	24	17.01	37.8	178	68.51	30.69	186	38.88	33.70
Hisham.jpg	50 %	21	23	35.28	169	118.55	28.09	222	73.54	31.97
Hisham.jpg	70 %	26	29.45	31.96	301	267.62	28.22	223	108.36	30.22
Hisham.jpg	90 %	33	56.06	26.7	118	140.56	22.58	181	109.10	25.19

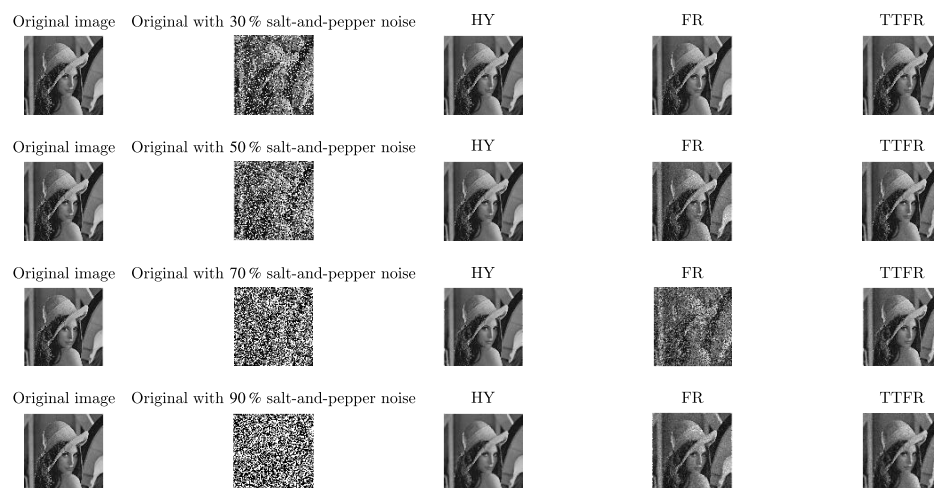


Figure 1. Comparing Lena image results of algorithms: The 1st column is the original image, the 2 column is the image after the noise, the 3, 4, and 5 columns are HYCGM, FR, and TTFR algorithms, respectively

6. Conclusions and future works

In this article, we provide a hybrid three-term conjugate gradient method (HYCGM) in which the search direction meets the descent requirement in every single instance. This is true regardless of the conjugate parameters that are selected and the lines that are searched. A minimal amount of work is required for the suggested approach to converge everywhere. We apply it to the issue of

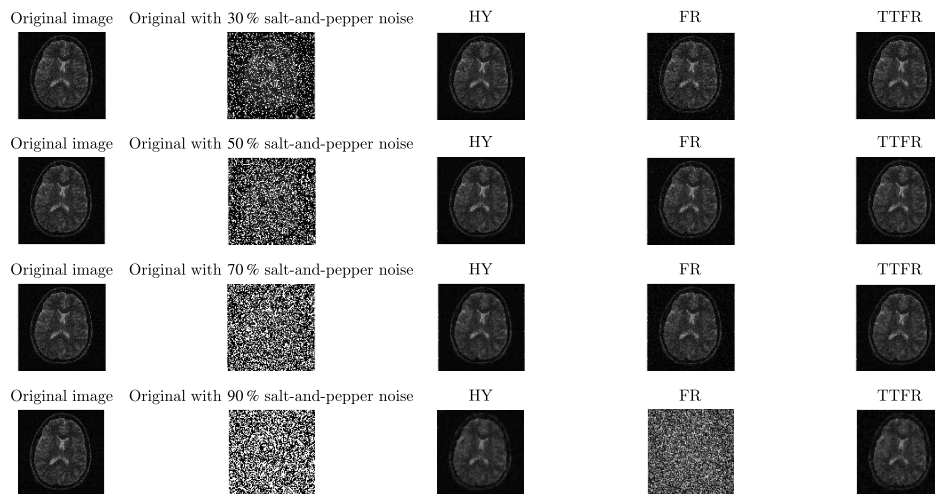


Figure 2. Comparing Brain image results of algorithms: The 1st column is the original image, the 2 column is the image after the noise, the 3, 4, and 5 columns are HYCGM, FR, and TTFR algorithms, respectively

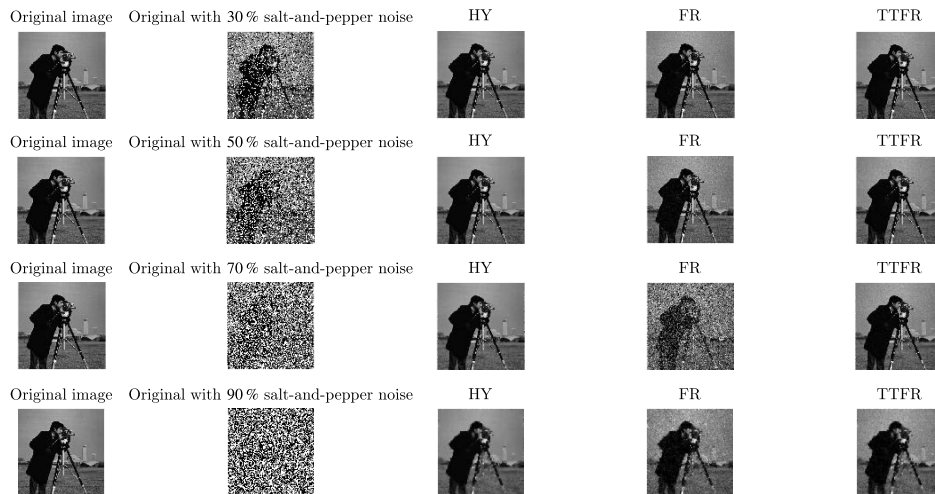


Figure 3. Comparing Cameraman image results of algorithms: The 1st column is the original image, the 2 column is the image after the noise, the 3, 4, and 5 columns are HYCGM, FR, and TTFR algorithms, respectively

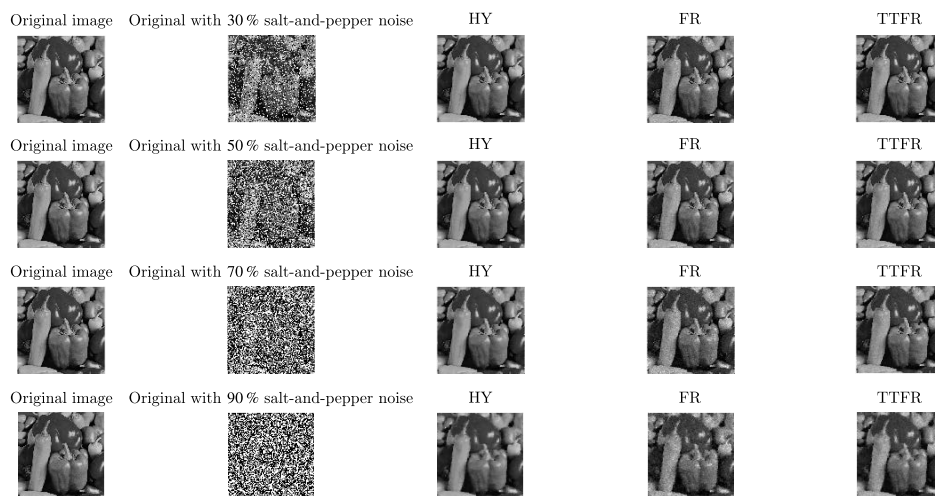


Figure 4. Comparing Peppers image results of algorithms: The 1st column is the original image, the 2 column is the image after the noise, the 3, 4, and 5 columns are HYCGM, FR, and TTFR algorithms, respectively

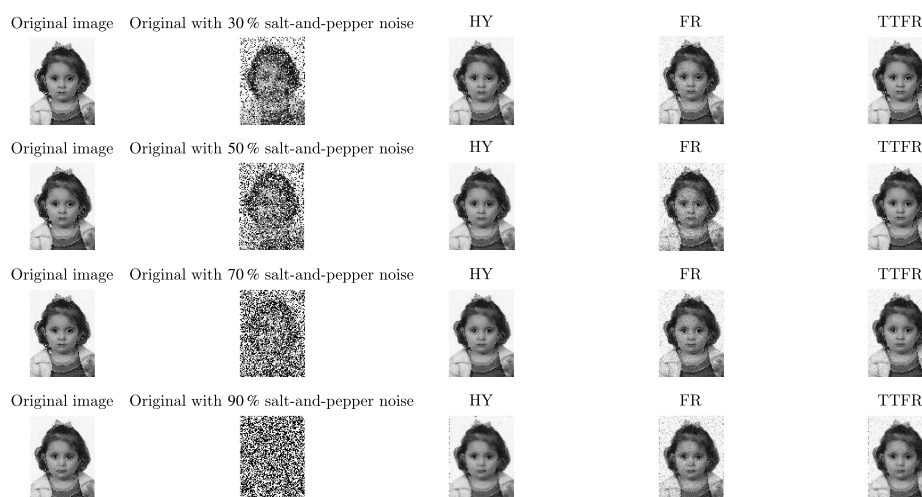


Figure 5. Comparing zainbl image results of algorithms: The 1st column is the original image, the 2 column is the image after the noise, the 3, 4, and 5 columns are HYCGM, FR, and TTFR algorithms, respectively

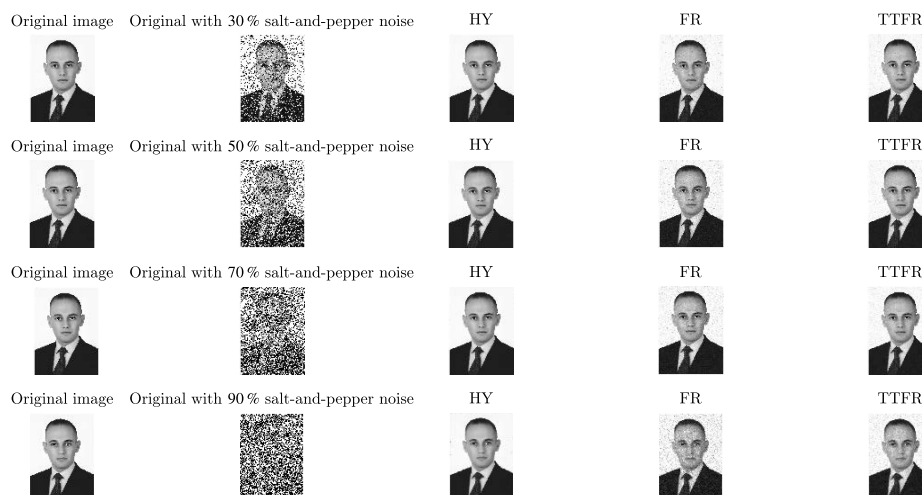


Figure 6. Comparing Hisham image results of algorithms: The 1st column is the original image, the 2 column is the image after the noise, the 3, 4, and 5 columns are HYCGM, FR, and TTFR algorithms, respectively

picture restoration, and the first numerical results show promise in terms of efficiency and applicability, even when compared to the most effective approaches that are now available. Contributions made to the study in which the slowness of the Fletcher and Reeves (FR) and three-term Fletcher and Reeves (TTFR) algorithms has been overcome, and the numerical results have been much improved in comparison to the Fletcher and Reeves (FR) and three-term Fletcher and Reeves (TTFR) algorithms, with reference to the fact that the approach satisfies the criterion of global convergence. We can also use the new algorithm in other applications (for example, artificial neural networks, fuzzy neural networks, and in the swarm intelligence algorithms, etc.) in future works.

References

- Aji S., Abubakar A.B., Kiri A.I., Ishaku A.* A spectral conjugate gradient-like method for convex constrained nonlinear monotone equations and signal recovery // *Nonlinear Convex Analysis and Optimization*. — 2022. — Vol. 1, No. 1. — P. 1–23.

- Aminifard Z., Babaie-Kafaki S.* Dai–Liao extensions of a descent hybrid nonlinear conjugate gradient method with application in signal processing // Numerical Algorithms. — 2022. — Vol. 89, No. 3. — P. 1369–1387. — <https://doi.org/10.1007/s11075-021-01157-y>
- Babaie-Kafaki S., Mirhoseini N., Aminifard Z.* A descent extension of a modified Polak–Ribière–Polyak method with application in image restoration problem // Optimization Letters. — 2023. — Vol. 17, No. 2. — P. 351–367. — <https://doi.org/10.1007/s11590-022-01878-6>
- Dai Y.H.* New conjugacy conditions and related nonlinear conjugate gradient methods // Applied Mathematics and Optimization. — 2001. — Vol. 43, No. 1. — P. 87–101. — <https://doi.org/10.1007/s002450010019>
- Dai Z., Zhu H., Zhang X.* Dynamic spillover effects and portfolio strategies between crude oil, gold and Chinese stock markets related to new energy vehicle // Energy Economics. — 2022. — Vol. 109. — 105959. — <https://doi.org/10.1016/j.eneco.2022.105959>
- Elhamid M.A., Khudhur H.M.* A globally convergent of two conjugate gradient methods with application to image restoration problems // Numerical Algebra, Control and Optimization. — 2024. — <https://doi.org/10.3934/naco.2024027>
- Fletcher R.* Function minimization by conjugate gradients // The Computer Journal. — 1964. — Vol. 7, No. 2. — P. 149–154. — <https://doi.org/10.1093/comjnl/7.2.149>
- Fletcher R.* Practical methods of optimization. Vol. 1: Unconstrained optimization. — Chichester, UK: Wiley, 1980. — <https://books.google.iq/books?id=igc8AQAAAMAJ>
- Hager W.W., Zhang H.* A survey of nonlinear conjugate gradient methods // Pacific Journal of Optimization. — 2006. — Vol. 2, No. 1. — P. 35–58. — <http://www.math.lsu.edu/~hozhang/papers/cgsurvey.pdf>
- Hassan B.A., Alashoor H.A.* On image restoration problems using new conjugate gradient methods // Indonesian Journal of Electrical Engineering and Computer Science. — 2023. — Vol. 29, No. 3. — P. 1438–1445. — <https://doi.org/10.11591/ijeecs.v29.i3.pp1438-1445>
- Hassan B.A., Sadiq H.* Efficient new conjugate gradient methods for removing impulse noise images // European Journal of Pure and Applied Mathematics. — 2022. — Vol. 15, No. 4. — P. 2011–2021. — <https://doi.org/10.29020/nybg.ejpam.v15i4.4568>
- Hassan Ibrahim A., Kumam P., Hassan B.A., Bala Abubakar A., Abubakar J.* A derivative-free three-term Hestenes–Stiefel type method for constrained nonlinear equations and image restoration // International Journal of Computer Mathematics. — Vol. 99, No. 5. — P. 1041–1065. — <https://doi.org/10.1080/00207160.2021.1946043>
- Hestenes M.R., Stiefel E.* Methods of conjugate gradients for solving linear systems // Journal of Research of the National Bureau of Standards. — 1952. — Vol. 49, No. 6. — P. 409–436. — <https://doi.org/10.6028/jres.049.044>
- Ismail Ibrahim Y., Mohammed Khudhur H.* Modified three-term conjugate gradient algorithm and its applications in image restoration // Indonesian Journal of Electrical Engineering and Computer Science. — 2022. — Vol. 28, No. 3. — P. 1510–1517. — <https://doi.org/10.11591/ijeecs.v28.i3.pp1510-1517>
- Jiang X., Liao W., Yin J., Jian J.* A new family of hybrid three-term conjugate gradient methods with applications in image restoration // Numerical Algorithms. — 2022. — Vol. 91, No. 1. — P. 161–191. — <https://doi.org/10.1007/s11075-022-01258-2>
- Jiang X., Yang H., Yin J., Liao W.* A three-term conjugate gradient algorithm with restart procedure to solve image restoration problems // Journal of Computational and Applied Mathematics. — 2023. — Vol. 424. — 115020. — <https://doi.org/10.1016/j.cam.2022.115020>
- Khudhur H.M., Fawze A.A.M.* An improved conjugate gradient method for solving unconstrained optimisation and image restoration problems // International Journal of Mathematical Modelling and Numerical Optimisation. — 2023. — Vol. 13, No. 3. — P. 313–325. — <https://doi.org/10.1504/IJMMNO.2023.132286>

- Khudhur H. M., Hassan B. A., Aji S.* Superior formula for gradient impulse noise reduction from images // *International Journal of Applied and Computational Mathematics*. — 2024. — Vol. 10, No. 1. — P. 4. — <https://doi.org/10.1007/s40819-023-01637-w>
- Khudhur H. M., Mohammed H. H.* A new three-term conjugate gradient method for unconstrained optimisation and its applications in image restoration // *International Journal of Mathematics in Operational Research*. — 2024. — Vol. 28, No. 2. — P. 253–273. — <https://doi.org/10.1504/IJMOR.2024.138901>
- Laylani Y., Hassan B. A., Khudhur H. M.* A new class of optimization methods based on coefficient conjugate gradient // *European Journal of Pure and Applied Mathematics*. — 2022. — Vol. 15, No. 4. — P. 1908–1916.
- Laylani Y., Khudhur H. M., Nori E. M., Abbo K. K.* A hybridization of the Hestenes–Stiefel and Dai–Yuan conjugate gradient methods // *European Journal of Pure and Applied Mathematics*. — 2023. — Vol. 16, No. 2. — P. 1059–1067. — <https://doi.org/10.29020/nybg.ejpam.v16i2.4746>
- Li G., Tang C., Wei Z.* New conjugacy condition and related new conjugate gradient methods for unconstrained optimization // *Journal of Computational and Applied Mathematics*. — 2007. — Vol. 202, No. 2. — P. 523–539. — <https://doi.org/10.1016/j.cam.2006.03.005>
- Liu J. K., Zhao Y. X., Wu X. L.* Some three-term conjugate gradient methods with the new direction structure // *Applied Numerical Mathematics*. — 2020. — Vol. 150. — P. 433–443. — <https://doi.org/10.1016/j.apnum.2019.10.011>
- Liu Y., Storey C.* Efficient generalized conjugate gradient algorithms. Part 1: Theory // *Journal of Optimization Theory and Applications*. — 1991. — Vol. 69, No. 1. — P. 129–137. — <https://doi.org/10.1007/BF00940464>
- Narushima Y., Yabe H., Ford J. A.* A three-term conjugate gradient method with sufficient descent property for unconstrained optimization // *SIAM Journal on Optimization*. — 2011. — Vol. 21, No. 1. — P. 212–230. — <https://doi.org/10.1137/080743573>
- Polak E., Ribière G.* Note sur la convergence de méthodes de directions conjuguées // *Revue Française d'informatique et de Recherche Opérationnelle. Série Rouge*. — 1969. — Vol. 3, No. 16. — P. 35–43. — <https://doi.org/10.1051/m2an/196903r100351>
- Powell M. J. D.* A survey of numerical methods for unconstrained optimization // *SIAM Review*. — 1970. — Vol. 12, No. 1. — P. 79–97. — <https://doi.org/10.1137/1012004>
- Sellami B., Laskri Y., Benzine R.* A new two-parameter family of nonlinear conjugate gradient methods // *Optimization*. — 2015. — Vol. 64, No. 4. — P. 993–1009. — <https://doi.org/10.1080/02331934.2013.830118>
- Souli C., Ziadi R., Bencherif-Madani A., Khudhur H. M.* A hybrid CG algorithm for nonlinear unconstrained optimization with application in image restoration // *Journal of Mathematical Modeling*. — 2024. — Vol. 12, No. 2. — P. 301–317. — <https://doi.org/10.22124/JMM.2024.26151.2317>
- Wang X., Tian Y., Pang L.* A class of three-term derivative-free methods for large-scale nonlinear monotone system of equations and applications to image restoration problems // *Journal of Applied Mathematics and Computing*. — 2023. — Vol. 69, No. 1. — P. 1269–1296. — <https://doi.org/10.1007/s12190-022-01790-3>
- Yuan G., Li T., Hu W.* A conjugate gradient algorithm for large-scale nonlinear equations and image restoration problems // *Applied Numerical Mathematics*. — 2020. — Vol. 147. — P. 129–141. — <https://doi.org/10.1016/j.apnum.2019.08.022>
- Zhang L., Zhou W., Li D.* Global convergence of a modified Fletcher–Reeves conjugate gradient method with Armijo-type line search // *Numerische Mathematik*. — 2006a. — Vol. 104, No. 4. — P. 561–572. — <https://doi.org/10.1007/s00211-006-0028-z>

- Zhang L., Zhou W., Li D.* Some descent three-term conjugate gradient methods and their global convergence // Optimization Methods and Software. — 2007. — Vol. 22, No. 4. — P. 697–711. — <https://doi.org/10.1080/10556780701223293>
- Zhang L., Zhou W., Li D. H.* A descent modified Polak–Ribière–Polyak conjugate gradient method and its global convergence // IMA Journal of Numerical Analysis. — 2006b. — Vol. 26, No. 4. — P. 629–640. — <https://doi.org/10.1093/imanum/drl016>
- Zoutendijk G.* Nonlinear programming, computational methods // Integer and Nonlinear Programming. — Amsterdam: North-Holland, 1970. — P. 37–86.

УДК: 517.957, 537.611, 51-73

Локализованные нелинейные волны уравнения синус-Гордона в модели с тремя протяженными примесями

К. Ю. Самсонов^{1,а}, Д. К. Кабанов^{2,б}, В. Н. Назаров^{3,с}, Е. Г. Екомасов^{2,д}

¹Тюменский государственный университет,
Россия, 625003, г. Тюмень, ул. Володарского, д. 6

²Уфимский университет науки и технологий,
Россия, 450076, г. Уфа, ул. Заки Валиди, д. 32

³Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН,
Россия, 450075, г. Уфа, пр. Октября, д. 151

E-mail: ^а k.y.samsonov@gmail.com, ^б danya.kabanov.95@mail.ru, ^с nazarovvn@gmail.com,
^д ekomasoveg@gmail.com

Получено 14.03.2024, после доработки — 28.05.2024.

Принято к публикации 28.05.2024.

В работе с помощью аналитических и численных методов рассматривается задача о структуре и динамике связанных локализованных нелинейных волн в модели синус-Гордона с тремя одинаковыми притягивающими протяженными примесями, которые моделируются пространственной неоднородностью периодического потенциала. Найдены два возможных типа связанных нелинейных локализованных волн — бризерного и солитонного. Проведен анализ влияния параметров системы и начальных условий на структуру локализованных волн, их амплитуду и частоту. Связанные колебания локализованных волн бризерного типа, как и для случая точечных примесей, представляет собой сумму трех гармонических колебаний: синфазного, синфазно-антифазного и антифазного типа. Частотный анализ локализованных на примесях волн, которые были получены в ходе численного эксперимента, выполнялся с помощью дискретного преобразования Фурье. Для анализа локализованных волн бризерного типа применялся численный метод конечных разностей. Для проведения качественно анализа полученных численных результатов задача решалась аналитически для случая малых амплитуд локализованных на примесях колебаний. Показано, что при определенных параметрах примеси (глубина, ширина) можно получить локализованные волны солитонного типа. Найдены области значений параметров системы, в которых существуют локализованные волны определенного типа, а также область перехода от бризерных к солитонным типам колебаний. Были определены значения глубины и ширины примеси, при которых наблюдается переход от бризерного к солитонному типу локализованных колебаний. Были получены и рассмотрены различные сценарии колебаний солитонного типа с отрицательными и положительными значениями амплитуд на всех трех примесях, а также и смешанные случаи. Показано, что в случае расстояния между примесями много меньше единицы отсутствует переходная область, в которой зарождающийся бризер после потери энергии на излучение переходит в солитон. Показано, что рассмотренная модель может быть использована, например, для описания динамики волн намагниченности в мультислойных магнетиках.

Ключевые слова: уравнение синус-Гордона, кинк, бризер, солитон

UDC: 517.957, 537.611, 51-73

Localized nonlinear waves of the sine-Gordon equation in a model with three extended impurities

K. Yu. Samsonov^{1,a}, D. K. Kabanov^{2,b}, V. N. Nazarov^{3,c}, E. G. Ekomasov^{2,d}

¹University of Tyumen,

6 Volodarskogo st., Tyumen, 625003, Russia

²Ufa University of Science and Technology,

32 Zaki Validi st., Ufa, 450076, Russia

³Institute of Molecule and Crystal Physics UFRC RAS,

151 Oktyabrya ave., Ufa, 450075, Russia

E-mail: ^a k.y.samsonov@gmail.com, ^b danya.kabanov.95@mail.ru, ^c nazarovvn@gmail.com,
^d ekomasoveg@gmail.com

Received 14.03.2024, after completion — 28.05.2024.

Accepted for publication 28.05.2024.

In this work, we use analytical and numerical methods to consider the problem of the structure and dynamics of coupled localized nonlinear waves in the sine-Gordon model with three identical attractive extended “impurities”, which are modeled by spatial inhomogeneity of the periodic potential. Two possible types of coupled nonlinear localized waves are found: breather and soliton. The influence of system parameters and initial conditions on the structure, amplitude, and frequency of localized waves was analyzed. Associated oscillations of localized waves of the breather type as in the case of point impurities, are the sum of three harmonic oscillations: in-phase, in-phase-antiphase and antiphase type. Frequency analysis of impurity-localized waves that were obtained during a numerical experiment was performed using discrete Fourier transform. To analyze localized breather-type waves, the numerical finite difference method was used. To carry out a qualitative analysis of the obtained numerical results, the problem was solved analytically for the case of small amplitudes of oscillations localized on impurities. It is shown that, for certain impurity parameters (depth and width), it is possible to obtain localized soliton-type waves. The ranges of values of the system parameters in which localized waves of a certain type exist, as well as the region of transition from breather to soliton types of oscillations, have been found. The values of the depth and width of the impurity at which a transition from the breather to the soliton type of localized oscillations is observed were determined. Various scenarios of soliton-type oscillations with negative and positive amplitude values for all three impurities, as well as mixed cases, were obtained and considered. It is shown that in the case when the distance between impurities much less than one, there is no transition region where which the nascent breather, after losing energy through radiation, transforms into a soliton. It is shown that the considered model can be used, for example, to describe the dynamics of magnetization waves in multilayer magnets.

Keywords: sine-Gordon equation, kink, breather, soliton

Citation: *Computer Research and Modeling*, 2024, vol. 16, no. 4, pp. 855–868 (Russian).

1. Введение

Для описания современных физических процессов в теории нелинейных колебаний и волн проводятся исследования нелинейных дифференциальных уравнений. Исследование нелинейных волновых процессов позволило сделать ряд фундаментальных открытий [Dauxois, Peyrard, 2010]. Были найдены решения, которые описывают уединенные волны, сохраняющие свою форму и скорость во времени, в том числе при взаимодействии друг с другом, — солитоны. Открытие новых солитонных решений, описание их свойств и поведение интересны как с фундаментальной, так и с прикладной точки зрения. Одним из самых ярких представителей подобных уравнений является уравнение синус-Гордона (УСГ) [Cuevas-Maraver, Kevrekidis, Williams, 2014]. Данное уравнение описывает волновые процессы в самых разнообразных областях естествознания: геологии [Быков, 2000], молекулярной биологии [Chevizovich et al., 2020], физике и космологии [Cuevas-Maraver, Kevrekidis, Williams, 2014]. Например, в физике конденсированного состояния оно применимо при описании динамики волн намагниченности в ферромагнитных материалах [Шамсутдинов и др., 2009], движения дислокаций в кристаллах [Браун, Кившарь, 2008], динамики ансамбля взаимодействующих дислокаций в линейном дефекте электроконвективной структуры жидкого кристалла [Делев и др., 2019]. УСГ, будучи нелинейным уравнением в частных производных, является полностью интегрируемым. Известны точные решения УСГ в виде кинка, бризера, солитона и более сложных мультисолитонных решений [Cuevas-Maraver, Kevrekidis, Williams, 2014; Kalbermann, 2004; Ferreira, Piette, Zakrzewski, 2008]. Исследование влияния различных возмущений и модификаций на решения УСГ является актуальной задачей современной теории нелинейных волн. Для использования в различных приложениях часто в уравнение синус-Гордона добавляют дополнительные слагаемые, учитывающие наличие внешних сил, диссипации в системе, неоднородности параметров среды [Cuevas-Maraver, Kevrekidis, Williams, 2014; Браун, Кившарь, 2008; Dorey et al., 2021; Fabian, Kohl, Biswas, 2009]. Получаемое в результате такой модификации уравнение синус-Гордона уже не имеет точных аналитических решений. Часто для приближенного решения таких задач применяется теория возмущений для солитонов или метод коллективных координат [Cuevas-Maraver, Kevrekidis, Williams, 2014; Saadatmand et al., 2014]. Например, исследована динамика кинков, солитонов и бризеров под действием различного вида внешней силы (являющейся функцией от времени и пространственных переменных) [Gonzalez et al., 2017]. Еще одним популярным направлением исследований является изучение влияния пространственной модуляции периодического потенциала (или примеси) на динамику кинков, бризеров и солитонов УСГ [Baron, Zakrzewski, 2016]. Одними из часто рассматриваемых видов примеси являются точечная примесь [Браун, Кившарь, 2008] и протяженная примесь прямоугольного вида [Екомасов и др., 2023]. Подобные задачи имеют и большой практический интерес. Например, модель синус-Гордона с примесями применима для описания динамики магнитных неоднородностей для случая многослойного ферромагнетика [Ekomasov, Murtazin, Nazarov, 2015]. Показано, что кинк-примесное взаимодействие может приводить к генерации локализованных на притягивающих примесях волн (или примесной моды) [Ekomasov, Gumerov, Murtazin, 2016; Gumerov et al., 2019]. Также притягивающая примесь может приводить и к возбуждению мультисолитонов УСГ. Случай двух примесей [Ekomasov et al., 2018; Екомасов, Гумеров, 2013] дает большое разнообразие новых мультисолитонных решений и динамических эффектов по сравнению со случаем одной примеси. Можно ожидать еще большего разнообразия решений и эффектов при наличии трех и более примесей в системе. Работы [Екомасов и др., 2023; Екомасов и др., 2022], в которых исследованы динамика кинков и связанные нелинейные волны бризерного типа, локализованные на трех одинаковых точечных примесях, подтвердили эти ожидания. Показано, что связанные колебания локализованных на трех точечных примесях волн бризерного типа можно описать системой дифференциальных уравнений аналогичной системе, полученной для модели связанных трех гармонических осцилляторов. А колебания таких

волн представляют собой сумму трех типов гармонических колебаний. В данной работе исследуется интересный с практической точки зрения случай трех протяженных притягивающих примесей, являющихся генераторами для возбуждения связанных локализованных нелинейных волн.

2. Локализованные нелинейные волны бризерного типа

Рассмотрим вещественное скалярное поле $u(x, t)$, динамика которого описывается уравнением синус-Гордона в модели с примесями следующего вида:

$$u_{tt} - u_{xx} + K(x) \sin u = 0, \quad (1)$$

где $K(x)$ — функция, описывающая пространственную неоднородность периодического потенциала. Ранее был рассмотрен случай трех одинаковых точечных примесей [Екомасов и др., 2023; Екомасов и др., 2022]. Для описания связанных колебаний трех нелинейных волн бризерного типа, локализованных на трех одинаковых точечных примесях [Екомасов и др., 2022], была получена система дифференциальных уравнений для трех гармонических осцилляторов со связью упругого типа. Решения этой системы уравнений для частот примесных мод хорошо аппроксимируют результаты прямого численного моделирования нелинейной системы. Показано, что связанные колебания нелинейных волн бризерного типа, расположенных на одинаковом расстоянии друг от друга, представляют собой сумму трех гармонических колебаний: синфазного, синфазно-антифазного и антифазного типа. Синфазным типом называется случай, когда все три локализованные волны колеблются в одной фазе. Случай, когда первая и третья примесные моды колеблются в противофазе, а вторая не возбуждается между ними, называется антифазным типом. Смешанным типом колебаний (или синфазно-антифазным) называется случай, когда две примесные моды колеблются в одинаковой фазе, а третья — в противоположной им фазе. Отметим, что для случая трех точечных примесей не удалось получить локализованные волны солитонного типа. Для прикладных задач, использующих уравнение (1), реалистичней рассмотреть случай протяженных примесей [Екомасов и др., 2023; Lizunova et al., 2022]. В общем случае такую задачу можно решить только с помощью численных методов.

На сегодняшний день разработано достаточно большое количество методов численного решения подобных уравнений [Saadatmand et al., 2014; Ekomasov, Gumerov, Kudryavtsev, 2017; Dodd et al., 1982]. Воспользуемся надежным методом конечных разностей, часто используемым при решении модифицированного уравнения синус-Гордона [Ekomasov, Gumerov, Murtazin, 2016; Ekomasov, Gumerov, Kudryavtsev, 2017]. Выберем трехслойную явную схему решения с аппроксимацией производных на пятиточечном шаблоне типа «крест». Это численная схема второго порядка аппроксимации по Δx и τ , где Δx — шаг по координате, τ — шаг по времени. Она обладает условной устойчивостью $\frac{\tau}{\Delta x} \ll \frac{1}{2}$. В нашем случае схема является одношаговой, использует сравнительно небольшое количество обращений к памяти и обладает потенциалом для оптимизации вычислительного алгоритма. Частотный анализ колебаний локализованных волн, которые рассчитываются численно, выполняется с помощью дискретного преобразования Фурье. Для его расчета используется алгоритм быстрого преобразования Фурье (БПФ). Этот алгоритм обладает хорошей производительностью, однако наиболее оптимизированные реализации БПФ накладывают определенные ограничения на исходный ряд. Для подготовки данных исходная дискретная зависимость интерполируется кубическим сплайном с естественными граничными условиями, из которого строится новая дискретная зависимость на равномерной сетке с увеличенным количеством точек аппроксимации. Из новой дискретной зависимости рассчитывается частотный спектр с помощью БПФ. Для повышения точности определения частоты точки максимумов частотного спектра уточняются с помощью интерполяции сплайном Акимы.

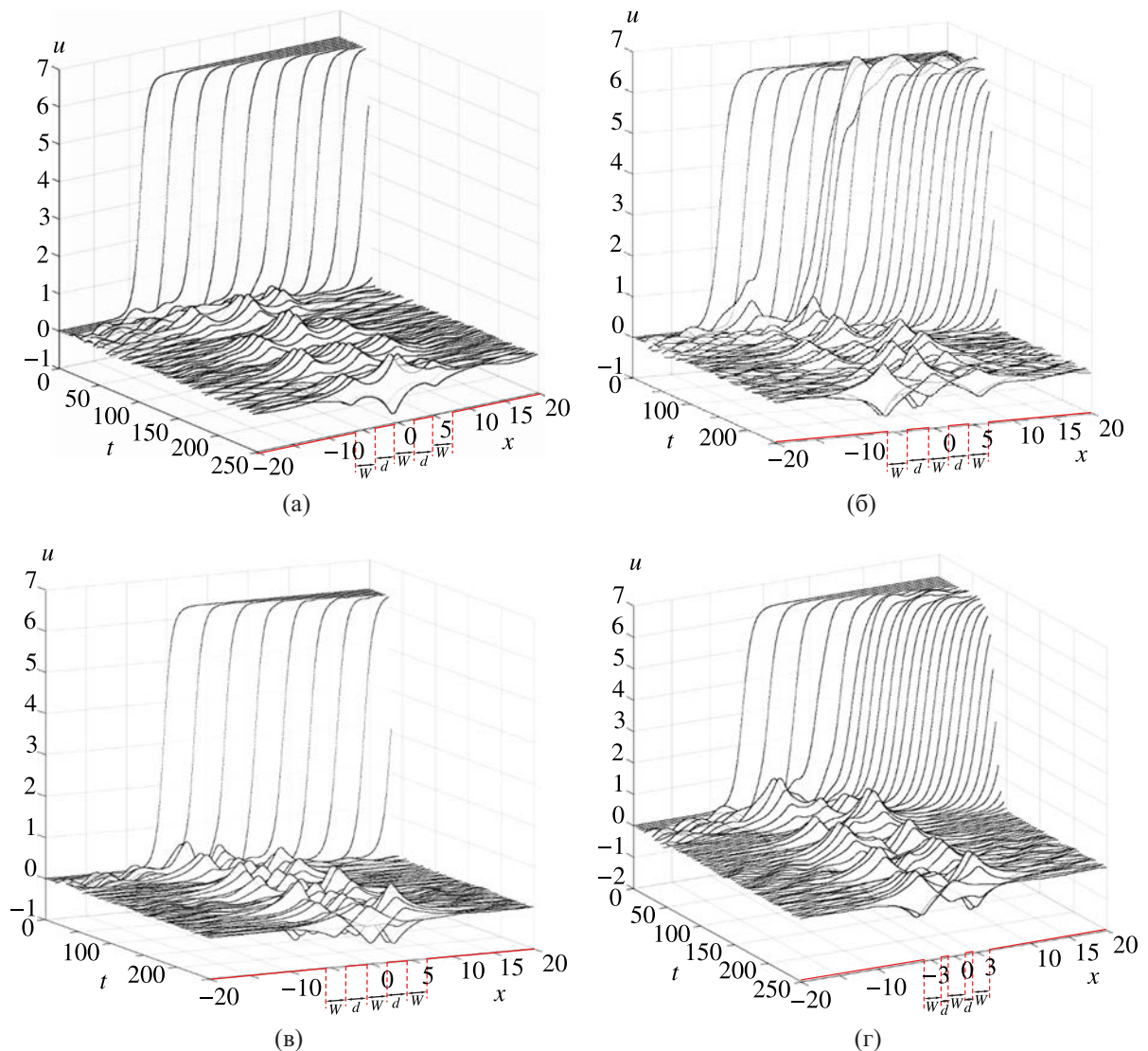


Рис. 1. Возбуждение и эволюция нелинейных волн бризерного типа в области протяженных примесей в виде зависимости u от координаты x и времени t для различных параметров d и v_0 при $\Delta K = 1,2$, $W = 1$: а) $d = 4$, $v_0 = 0,785$; б) $d = 4$, $v_0 = 0,585$; в) $d = 2$, $v_0 = 0,8$; г) $d = 2$, $v_0 = 0,653$. Красными пунктирными линиями обозначены три области местоположения примесей шириной W

Рассмотрим далее случай трех одинаковых протяженных примесей, используя функцию $K(x)$ прямоугольного вида:

$$K(x) = \begin{cases} 1, & \text{если } \frac{W}{2} < |x| < \frac{W}{2} + d, \quad |x| > \frac{3W}{2} + d, \\ 1 - \Delta K, & \text{если } |x| < \frac{W}{2}, \quad \frac{W}{2} + d \leq |x| \leq \frac{3W}{2} + d, \end{cases} \quad (2)$$

где ΔK , W — постоянные величины, d — параметр, описывающий расстояние между примесями. Если параметр $\Delta K > 0$, примесь является эффективной потенциальной ямой для кинка, а при $\Delta K < 0$ — потенциальным барьером. Численный эксперимент проведен следующим образом. В начальный момент времени на некотором расстоянии от примесей имеется кинк — $u(x, t) = 4 \arctan \left(\exp \left[\frac{x - v_0 t}{\sqrt{1 - v_0^2}} \right] \right)$, движущийся с постоянной скоростью v_0 . Граничные условия в на-

чальный момент времени следующие: $u(x=0) = 0$, $u(x=\infty) = 2\pi$. После прохождения кинком области трех примесей исследуются структура и динамика локализованных волн, возбуждаемых на примесях.

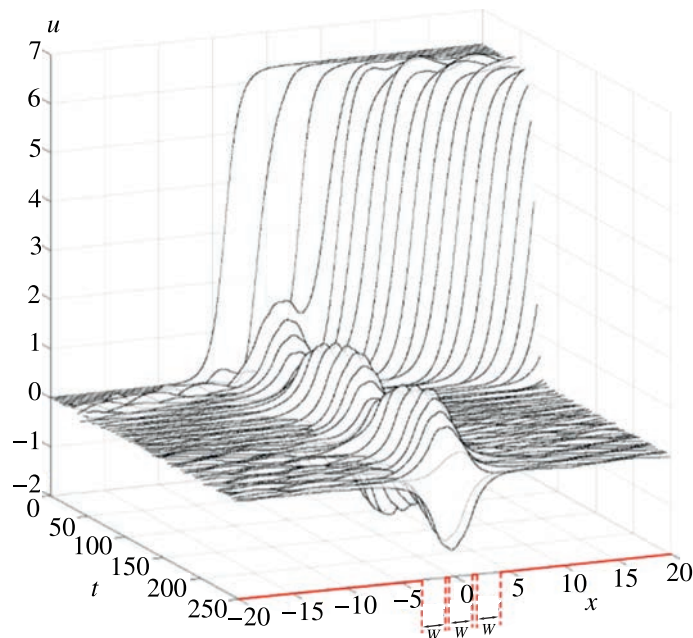


Рис. 2. Возбуждение и эволюция нелинейных волн бризерного типа в области протяженных примесей в виде зависимости u от координаты x и времени t при $\Delta K = 1,2$, $W = 1$ для $d = 0,25$, $v_0 = 0,58$. Красными пунктирными линиями обозначены три области местоположения примесей шириной W

Рассмотрим случай притягивающей примеси, так как именно в этом случае происходит генерация локализованных волн [Kivshar et al., 1998]. При значениях $\Delta K < 1$ в области примесей возбуждаются нелинейные волны бризерного типа (см. рис. 1 и 2). Амплитуда возбуждаемой на примеси волны зависит от начальной скорости кинка. Как и для случая точечных примесей, можно построить зависимость амплитуд $a_1(t)$, $a_2(t)$ и $a_3(t)$ трех локализованных на примесях волн от времени и провести их частотный фурье-анализ (рис. 3). На рис. 1 видно, что, так же как и для случая трех точечных примесей, можно получить случаи синфазных (рис. 1, *a*) и антифазных (рис. 1, *б*, *в*) типов колебаний. Так как локализованные на примесях волны возбуждаются не одновременно, а через промежуток времени Δt , начальная скорость кинка v_0 способна влиять и на начальную разность фаз их колебаний. При изменении v_0 численно не удастся получить произвольную начальную разность фаз примесных волн. Из-за этого не всегда удастся возбудить синфазные колебания волн. Из анализа рис. 1–3 можно утверждать, что в зависимости от d меняется тип связи между возбуждаемыми локализованными нелинейными волнами. При уменьшении расстояния между примесями разность фаз локализованных волн сокращается до нуля, и через определенный промежуток времени они начинают колебаться синфазно. Антифазные же колебания становятся неустойчивыми, и возбудить такой режим при достаточно малом d не удастся. При дальнейшем уменьшении расстояния между примесями ($d \ll 1$) можно наблюдать случай перехода трех локализованных на примесях волн в одну (рис. 2, рис. 3, *a*). Из-за взаимодействия самих волн в случае биений (рис. 1, *г*; рис. 3, *б*, *в*) наблюдается зависимость амплитуды от времени. Фурье-анализ показывает, что в спектре таких колебаний могут присутствовать как две, так и три основные частоты (см. рис. 3, *б*, *в*). Случаи биений являются наиболее часто встречающимся типом получаемых при численном счете колебаний, тогда как сценарий синфазных или антифазных колебаний встречается только в частных случаях. На рис. 4 (кривые 1, 2 и 3)

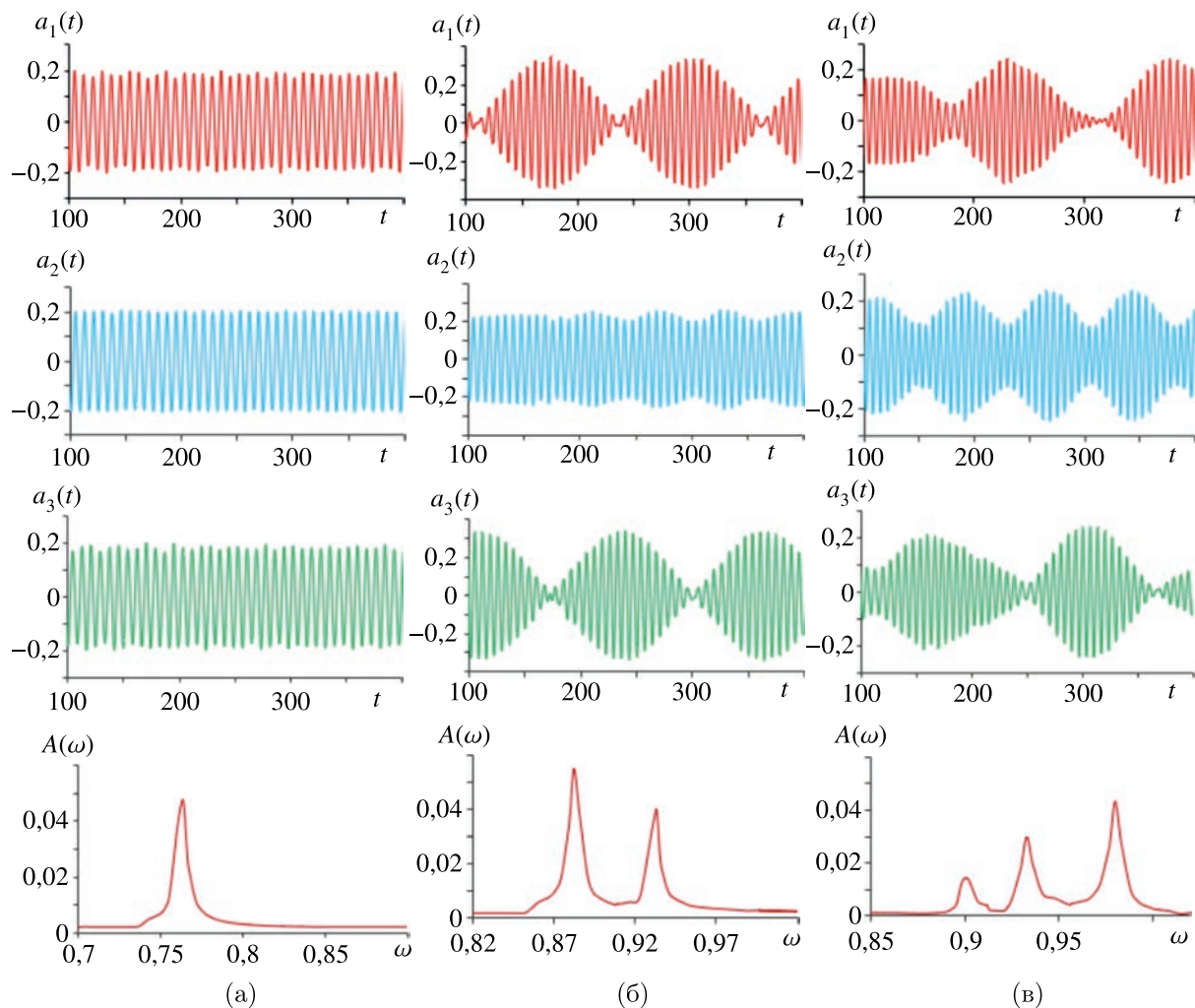


Рис. 3. Зависимость амплитуд локализованных колебаний на первой примеси $a_1(t)$, второй — $a_2(t)$ и третьей — $a_3(t)$ от времени t и соответствующее фурье-разложение $A(\omega)$ для $\Delta K = 0,8$, $W = 1$ при различных расстояниях между примесями: а) $d = 0,25$, $v_0 = 0,45$; б) $d = 3$, $v_0 = 0,62$; в) $d = 4$, $v_0 = 0,52$

представлена зависимость найденных численно основных трех частот колебаний от расстояния между примесями d . Кривые 2 и 3 не начинаются с нуля, так как при малых d устойчивостью обладают лишь синфазные колебания.

Ранее [Ekomasov, Gumerov, Murtazin, 2016] было показано, что для одиночной и двойной протяженной примеси аналитическое решение задачи можно получить для случая малых амплитуд колебаний. В рассмотренных случаях УСГ сводилось к уравнению Шрёдингера, решение которого качественно совпадало с результатами численного моделирования. Рассмотрим случай малых амплитуд, т. е. $u \ll 1$. Тогда можем заменить $\sin u \rightarrow u$ и из уравнения (1) получим

$$u_{tt} - u_{xx} + K(x)u = 0. \quad (3)$$

Будем искать решение (3) в виде

$$u = \psi e^{-i\omega t}, \quad (4)$$

где $\psi = \psi(x)$, ω — частота колебаний. Подставив (4) в (3), получим следующее уравнение:

$$\psi_{xx} + (\omega^2 - K(x))\psi = 0. \quad (5)$$

Это уравнение типа Шрёдингера. Для случая $K(x)$ вида (2) в однородной области пространства уравнение (5) имеет вид

$$\psi_{xx} + (\omega^2 - 1)\psi = 0. \quad (6)$$

Соответствующее ему характеристическое уравнение запишется в виде

$$l^2 + \omega^2 - 1 = 0, \quad l = \pm \sqrt{1 - \omega^2}. \quad (7)$$

В области примеси уравнение (5) имеет вид

$$\psi_{xx} + (\omega^2 - 1 + \Delta K)\psi = 0. \quad (8)$$

Характеристическое уравнение для него запишется в виде

$$n_0^2 + \omega^2 - 1 + \Delta K = 0, \quad n_0 = \pm i \sqrt{\omega^2 + \Delta K - 1}, \quad n = \sqrt{\omega^2 + \Delta K - 1}. \quad (9)$$

При этом полагаем, что $1 - \omega^2 > 0$ и $\omega^2 + \Delta K - 1 > 0$, то есть $\Delta K > 1 - \omega^2 > 0$. Разобьем исследуемое пространство на семь областей, где для области вне примеси (области определения x , где $K(x) = 1$ из формулы (2)) решение ищем в виде экспоненциальных функций, а для области примеси (области определения x , где $K(x) = 1 - \Delta K$ из формулы (2)) решение ищем в виде тригонометрических функций:

$$\begin{aligned} \psi_1(x) &= A_1 e^{-lx} + B_1 e^{lx}, \\ \psi_2(x) &= A_2 \sin nx + B_2 \cos nx, \\ \psi_3(x) &= A_3 e^{-lx} + B_3 e^{lx}, \\ \psi_4(x) &= A_4 \sin nx + B_4 \cos nx, \\ \psi_5(x) &= A_5 e^{-lx} + B_5 e^{lx}, \\ \psi_6(x) &= A_6 \sin nx + B_6 \cos nx, \\ \psi_7(x) &= A_7 e^{-lx} + B_7 e^{lx}. \end{aligned} \quad (10)$$

Решение (10) содержит в себе ряд интересных частных случаев. Так, например, если $A_2 = A_4 = A_6 = 0$, то локализованные нелинейные волны колеблются синфазно или, в случае $A_2 = B_4 = A_6 = 0$, колебания имеют противофазную природу. Также можно получить комбинацию смешанных колебаний $A_2 = A_4 = B_6 = 0$.

Уравнения для вычисления дисперсионного соотношения получим, используя равенства функций $\psi = \psi(x)$ и производных от них по координате на границах областей, на бесконечности функции стремятся к нулю:

$$\begin{aligned} \lim_{x \rightarrow \infty} (A_1 e^{lx}) &= 0, \\ A_1 + B_1 &= B_2, \\ -lA_1 + lB_1 &= nA_2, \\ A_2 \sin nW + B_2 \cos nW &= A_3 e^{-lW} + B_3 e^{lW}, \\ nA_2 \cos nW - nB_2 \sin nW &= -lA_3 e^{-lW} + lB_3 e^{lW}, \\ A_3 e^{-l(W+d)} + B_3 e^{l(W+d)} &= A_4 \sin n(W+d) + B_4 \cos n(W+d), \\ -lA_3 e^{-l(W+d)} + lB_3 e^{l(W+d)} &= nA_4 \cos n(W+d) - nB_4 \sin n(W+d), \\ A_4 \sin n(2W+d) + B_4 \cos n(2W+d) &= A_5 e^{-l(2W+d)} + B_5 e^{l(2W+d)}, \\ nA_4 \cos n(2W+d) - nB_4 \sin n(2W+d) &= -lA_5 e^{-l(2W+d)} + lB_5 e^{l(2W+d)}, \\ A_5 e^{-l(2W+2d)} + B_5 e^{l(2W+2d)} &= A_6 \sin n(2W+2d) + B_6 \cos n(2W+2d), \\ -lA_5 e^{-l(2W+2d)} + lB_5 e^{l(2W+2d)} &= nA_6 \cos n(2W+2d) - nB_6 \sin n(2W+2d), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
A_6 \sin n(3W + 2d) + B_6 \cos n(3W + 2d) &= A_7 e^{-l(3W+2d)} + B_7 e^{l(3W+2d)}, \\
nA_6 \cos n(3W + 2d) - nB_6 \sin n(3W + 2d) &= -lA_7 e^{-l(3W+2d)} + lB_7 e^{l(3W+2d)}, \\
\lim_{x \rightarrow \infty} (B_7 e^{lx}) &= 0.
\end{aligned} \quad (11)$$

Проведя соответствующие вычисления, получим дисперсионное соотношение вида

$$\begin{aligned}
(2 \ln \operatorname{ctg} nW + l^2 - n^2)^3 &= 2e^{-2ld} (2 \ln \operatorname{ctg} nW + l^2 - n^2) (l^2 + n^2)^2 + \\
&+ (l^2 + n^2)^2 (2 \ln \operatorname{ctg} nW - l^2 + n^2) e^{-4ld}. \quad (12)
\end{aligned}$$

При больших расстояниях между примесями $d \rightarrow \infty$ полученное соотношение (12) преобразуется к виду

$$2 \ln \operatorname{ctg} nW + l^2 - n^2 = 0. \quad (13)$$

Выражение (13) является дисперсионным соотношением, полученным ранее для случая одной примеси. В случае $d \rightarrow 0$ выражение (12) преобразуется к виду

$$2 \ln \operatorname{ctg}^3 nW - 6 \ln \operatorname{ctg} nW + 3(l^2 - n^2) \operatorname{ctg}^2 nW - (l^2 - n^2) = 0, \quad (14)$$

который совпадает с дисперсионным соотношением для одной примеси утроенной ширины:

$$2 \ln \operatorname{ctg} 3nW + l^2 - n^2 = 0. \quad (15)$$

Подставляя в дисперсионное соотношение (12) значения $l = \sqrt{1 - \omega^2}$ и $n = \sqrt{\omega^2 + \Delta K - 1}$, получим

$$\begin{aligned}
&\left(2 \sqrt{1 - \omega^2} \sqrt{\omega^2 + \Delta K - 1} \operatorname{ctg} \sqrt{\omega^2 + \Delta K - 1} W + 2 - 2\omega^2 - \Delta K\right)^3 = \\
&= \Delta K^2 \left[2 \left(2 \sqrt{1 - \omega^2} \sqrt{\omega^2 + \Delta K - 1} \operatorname{ctg} \sqrt{\omega^2 + \Delta K - 1} W + 2 - 2\omega^2 - \Delta K\right) + \right. \\
&\left. + \left(2 \sqrt{1 - \omega^2} \sqrt{\omega^2 + \Delta K - 1} \operatorname{ctg} \sqrt{\omega^2 + \Delta K - 1} W - 2 + 2\omega^2 + \Delta K\right) e^{-2 \sqrt{1 - \omega^2} d}\right] e^{-2 \sqrt{1 - \omega^2} d}. \quad (16)
\end{aligned}$$

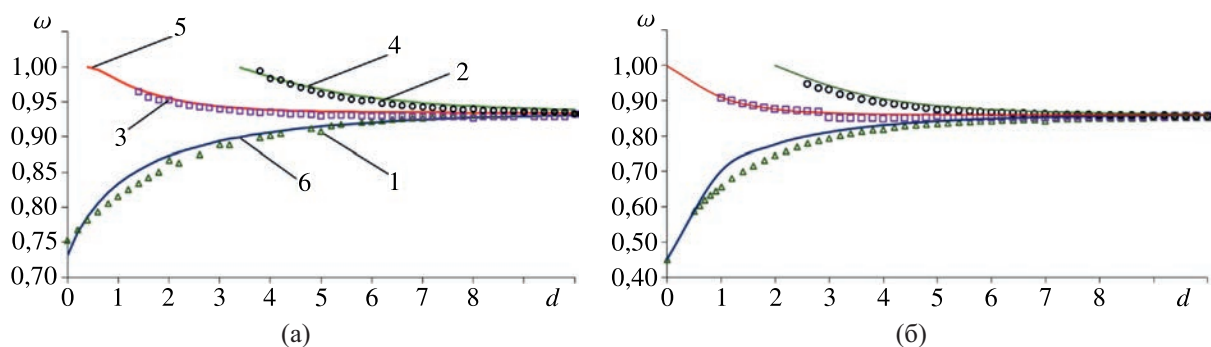


Рис. 4. Зависимость частот синфазных, антифазных и синфазно-антифазных колебаний от параметра d при $W = 1$: а) $\Delta K = 0,2$; б) $\Delta K = 1,2$. Кривые 1, 2 и 3 — численные результаты. Кривые 4, 5 и 6 — аналитические результаты

С помощью (16) построена зависимость $\omega(d)$, представленная на рис. 4 сплошными линиями. Из рисунка видно, что полученное дисперсионное выражение показывает хорошее количественное совпадение с численно рассчитанными значениями частот (представленными точечными кривыми).

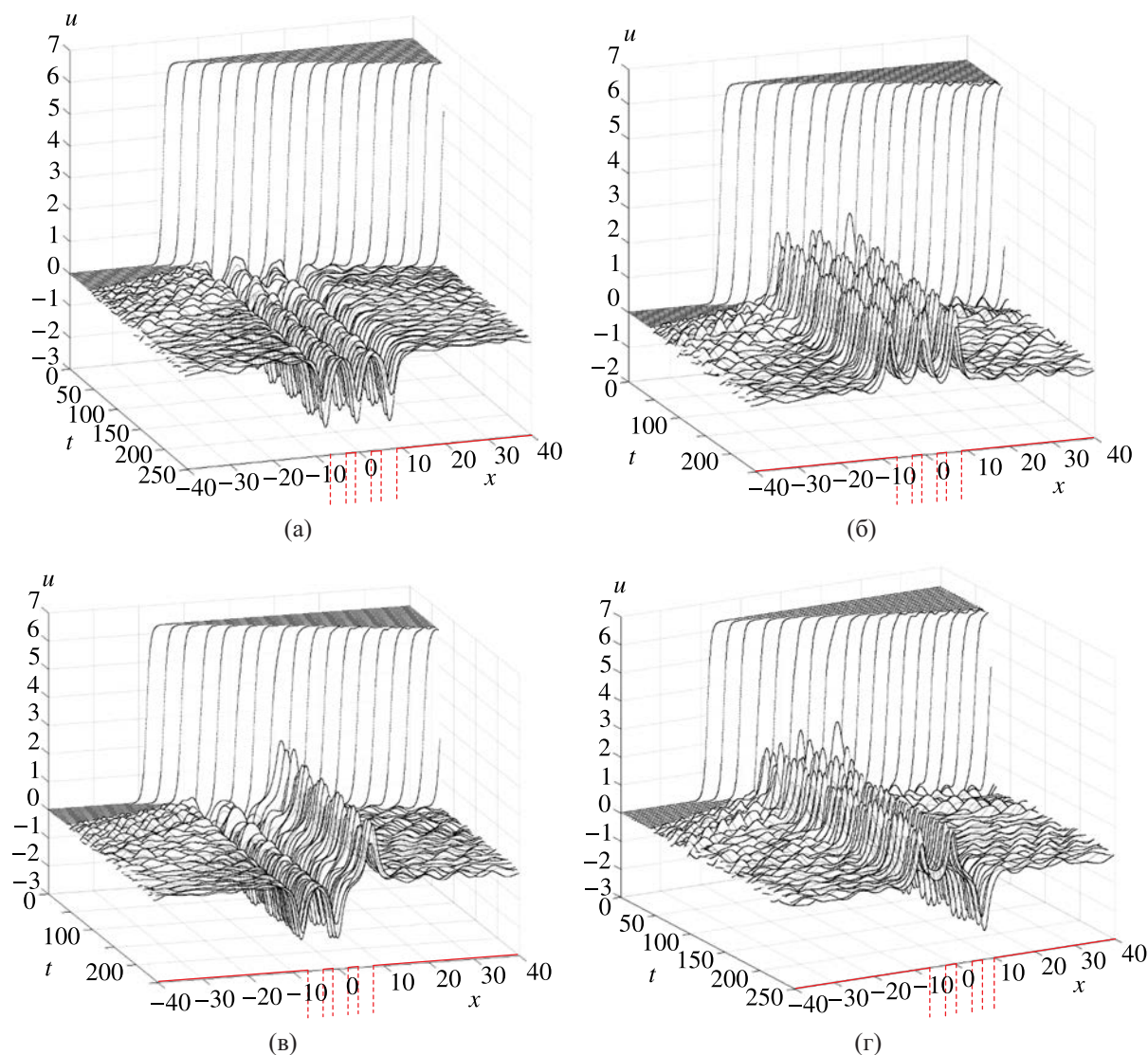


Рис. 5. Генерация локализованных волн солитонного типа на трех примесях в виде зависимости u от координаты x и времени t для $W = 1,7$, $K = -1,4$, $d = 6$: а) при $v_0 = 0,890$; б) при $v_0 = 0,84536$; в) при $v_0 = 0,860$; г) при $v_0 = 0,84236$. Красными пунктирными линиями обозначены три области местоположения примесей шириной W

3. Локализованные нелинейные волны солитонного типа

Для случаев одной и двух примесей было показано [Ekomasov, Gumerov, Murtazin, 2016], что при $\Delta K > 1$ и при достаточно большом W могут возникнуть решения солитонного типа, локализованные на примесях. Локализованные нелинейные волны солитонного типа найдены и для случая трех протяженных примесей. На рис. 5 продемонстрированы возможности управления структурой локализованных волн солитонного типа с помощью изменения начальной скорости кинка. Например, в результате численного эксперимента наблюдался случай, когда амплитуда связанных нелинейных волн солитонного типа отрицательная (рис. 5, а) или положительная (рис. 5, б). Наблюдались и случаи разнонаправленных амплитуд локализованных волн на примесях, например две примесные волны с положительной амплитудой и одна с отрицательной (рис. 5, в) или наоборот (рис. 5, г). Как и в случае с волнами бризерного типа, можно исследовать

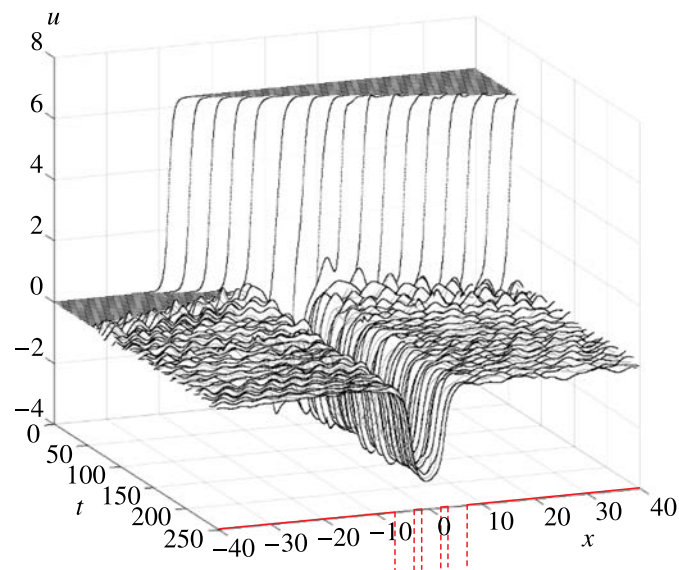


Рис. 6. Возбуждение и эволюция локализованных волн солитонного типа на трех примесях в виде зависимости u от координаты x и времени t при $K = -1,4$, $W = 1,7$, $d = 1$. Красными пунктирными линиями обозначены три области местоположения примесей шириной W

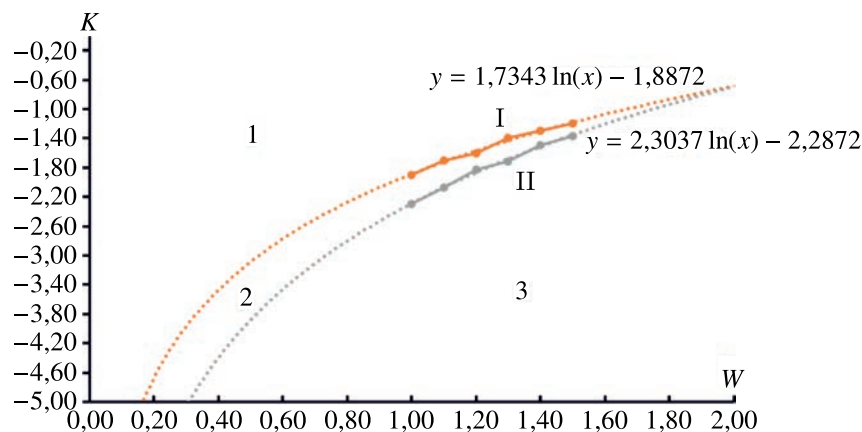


Рис. 7. Зависимость функции $K(W)$, определяющая области существования разных типов локализованных волн при $d = 6$, $v_0 = 0,9$: 1 — область возбуждения постоянных колебаний бризерного типа, 2 — область перехода колебаний из бризерного типа в солитонный, 3 — область возбуждения постоянных колебаний солитонного типа

довать генерацию локализованных волн при малых расстояниях между примесями (рис. 6). Из рис. 6 видно, что в этом случае можно также наблюдать переход трех локализованных волн в одну.

Для каждого значения расстояния между примесями возбуждение волн солитонного типа возможно лишь при достижении определенных значений параметров W и K . На графике с зависимостью $K(W)$ для случая определенного значения $d > 1$ (см. рис. 7) можно выделить области параметров, в которых наблюдаются локализованные волны бризерного и солитонного типа. На этом графике существует и особая переходная зона, в которой наблюдается вначале зарождение нелинейных волн бризерного типа, переходящих через некоторый промежуток времени в локализованные волны солитонного типа. Связано это с потерей энергии примесных мод, которая идет на излучение. Из рис. 7 также видно, что ширина такой переходной зоны стремится к нулю

с увеличением параметра W . Заметим, что аналогичную фазовую картину наблюдали ранее [Екомасов и др., 2022] для случая одной и двух протяженных примесей. Для случая, когда расстояние между примесями $d < 1$, на подобном графике отсутствует переходная зона (см. рис. 8).

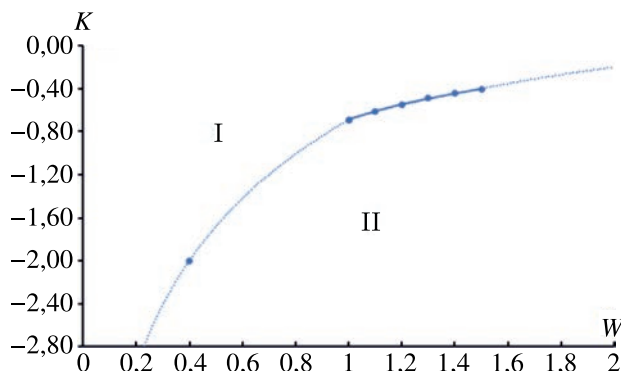


Рис. 8. Зависимость функции $K(W)$, определяющая области существования разных типов локализованных волн при $d = 0,5$, $v_0 = 0,9$. Жирные линии с точками являются результатами, полученными в ходе эксперимента, а пунктирные линии являются логарифмической аппроксимацией данных полученных в ходе численных решений

4. Заключение

С использованием численных методов для случая трех одинаковых протяженных притягивающих примесей найдены возможные структуры связанных колебаний локализованных волн бризерного типа при различных значениях начальной скорости кинка и параметров примесей. Построены графики зависимости амплитуд колебаний локализованных волн бризерного типа от времени и зависимость частот колебаний от расстояния между примесями. В случае возбуждения одной гармоники наблюдаемые колебания гармонические. При возбуждении двух гармоник возникают биения, колебания похожи на колебания в случае двух одинаковых примесей. При возбуждении трех гармоник форма колебаний сильно усложняется. Для случая локализованных волн бризерного типа малой амплитуды найдено дисперсионное уравнение и определены частоты синфазных, антифазных и синфазно-антифазных колебаний. Полученные зависимости качественно согласуются с результатами численных расчетов. Показано, что, увеличивая площадь потенциальной ямы, создаваемой протяженной притягивающей примесью, можно получить связанные локализованные волны солитонного типа. Найдены возможные структуры связанных колебаний локализованных волн солитонного типа. Продемонстрирована возможности управления структурой локализованных волн солитонного типа с помощью изменения начальной скорости кинка. Найдены области значений параметров системы K и W , при которых существуют локализованные волны определенного типа. Для случая, когда расстояния между примесями много меньше единицы, на подобном графике отсутствует переходная область, в которой зарождающийся бризер после потери энергии на излучение переходит в солитон.

Список литературы (References)

- Браун О. М., Кившарь Ю. С. Модель Френкеля – Конторовой: концепции, методы, приложения. — М.: Физматлит, 2008. — 519 с.
 Braun O. M., Kivshar Yu. S. The Frenkel – Kontorova model: concepts, methods, and applications. — Berlin: Springer, 2004. (Russ. Braun O. M., Kivshar Yu. S. Model Frenkelya – Kontorovoy: kontseptsii, metody, prilozheniya. — Moscow: Fizmatlit, 2008.)

- Быков В. Г. Нелинейные волновые процессы в геологических средах. — Владивосток: Дальнаука, 2000. — 190 с.
Bykov V. G. Nelinejnye volnovye processy v geologicheskikh sredah [Nonlinear wave processes in geological media]. — Vladivostok: Dal'nauka, 2000. — 190 p. (in Russian).
- Делев В. А., Назаров В. Н., Скалдин О. А., Батыршин Э. С., Екомасов Е. Г. Сложная динамика каскада кинк-антикинк-взаимодействий в линейном дефекте электроконвективной структуры нематика // Письма в ЖЭТФ. — 2019. — Т. 110, № 9. — С. 607–613.
Delev V. A., Nazarov V. N., Skaldin O. A., Batyrshin E. S., Ekomasov E. G. Complex dynamics of the cascade of kink-antikink interactions in a linear defect of the electroconvective structure of a nematic liquid crystal // *Jetp Lett.* — 2019. — Vol. 110. — P. 607–612. (Original Russian paper: *Delev V. A., Nazarov V. N., Skaldin O. A., Batyrshin E. S., Ekomasov E. G. Slozhnaya dinamika kaskada kink-antikinkovyh vzaimodejstvij v linejnom defekte elektrokonvektivnoj struktury nematika* // *Pis'ma v ZhETF.* — 2019. — Vol. 110, No. 9. — P. 607–613.)
- Екомасов Е. Г., Гумеров А. М. Коллективное влияние примесей на динамику кинков уравнения синус-Гордона // Компьютерные исследования и моделирование. — 2013. — Т. 5, № 3. — С. 403–412.
Ekomasov E. G., Gumerov A. M. Kollektivnoye vliyaniye primesey na dinamiku kinkov uravneniya sinus-Gordona [Collective influence of impurities on the dynamics of kinks of the sine-Gordon equation] // *Computer Research and Modeling.* — 2013. — Vol. 5, No. 3. — P. 403–412 (in Russian).
- Екомасов Е. Г., Кудрявцев Р. В., Самсонов К. Ю., Назаров В. Н., Кабанов Д. К. Динамика кинка уравнения синус-Гордона в модели с тремя одинаковыми притягивающими или отталкивающими примесями // Известия высших учебных заведений. Прикладная нелинейная динамика. — 2023. — Т. 31, № 6. — С. 693–709.
Ekomasov E. G., Kudryavtsev R. V., Samsonov K. Yu., Nazarov V. N., Kabanov D. K. Dinamika kinka uravneniya sinus-Gordona v modeli s trema odinakovymi prityagivayushchimi ili ottalkivayushchimi primesyami [Dynamics of the kink of the sine-Gordon equation in a model with three identical attractive or repulsive impurities] // *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Prikladnaya nelineynaya dinamika.* — 2023. — Vol. 31, No. 6. — P. 693–709 (in Russian).
- Екомасов Е. Г., Самсонов К. Ю., Гумеров А. М., Кудрявцев Р. В. Структура и динамика локализованных нелинейных волн уравнения синус-Гордона в модели с одинаковыми притягивающими примесями // Известия вузов. Прикладная нелинейная динамика. — 2022. — Т. 30, № 6. — С. 749–765.
Ekomasov E. G., Gumerov A. M. Struktura i dinamika lokalizovannykh nelineynykh voln uravneniya sinus-Gordona v modeli s odinakovymi prityagivayushchimi primesyami [Structure and dynamics of localized nonlinear waves of the sine-Gordon equation in a model with identical attractive impurities] // *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Prikladnaya nelineynaya dinamika.* — 2022. — Vol. 30, No. 6. — P. 749–765 (in Russian).
- Шамсутдинов М. А., Ломакина И. Ю., Назаров В. Н., Харисов А. Т., Шамсутдинов Д. М. Ферро- и антиферромагнитодинамика. Нелинейные колебания, волны и солитоны. — М.: Наука, 2009. — 456 с.
Shamsutdinov M. A., Lomakina I. Yu., Nazarov V. N., Kharisov A. T., Shamsutdinov D. M. Ferro- i antiferromagnetodina-mika. Nelineynyye kolebaniya. Volny i solitony [Ferro- and antiferromagnetodynamics. Nonlinear oscillations, waves and solitons]. — Moscow: Nauka, 2009 (in Russian).
- Baron H. E., Zakrzewski W. J. Collective coordinate approximation to the scattering of solitons in modified NLS and sine-Gordon models // *Journal of High Energy Physics.* — 2016. — Vol. 2016, No. 6. — P. 185.
- Chevizovich D., Michieletto D., Mvogo A., Zakiryanov F., Zdravkovic S. A review on nonlinear DNA physics // *R. Soc. Open Sci.* — 2020. — Vol. 7, No. 11. — P. 200774.
- Cuevas-Maraver J., Kevrekidis P. G., Williams F. (eds.) The sine Gordon model and its applications: from pendula and Josephson junctions to gravity and high-energy physics. — Springer, 2014. — 263 p.
- Dauxois T., Peyrard M. Physics of solitons. — New York: Cambridge University Press, 2010. — 436 p.
- Dodd R. K., Eilbeck J. C., Gibbon J. D., Morris H. C. Solitons and nonlinear wave equations. — London: Academic Press, 1982. — 630 p.
- Dorey P., Gorina A., Perapechka I., Romanczukiewicz T., Shnir Y. Resonance structures in kinkantikink collisions in a deformed sine-Gordon model // *Journal of High Energy Physics.* — 2021. — Vol. 2021, No. 9. — P. 145.

- Ekomasov E. G., Gumerov A. M., Kudryavtsev R. V.* Resonance dynamics of kinks in the sineGordon model with impurity, external force and damping // *Journal of Computational and Applied Mathematics*. — 2017. — Vol. 312. — P. 198–208.
- Ekomasov E. G., Gumerov A. M., Kudryavtsev R. V., Dmitriev S. V., Nazarov V. N.* Multisoliton dynamics in the sine-Gordon model with two point impurities // *Brazilian Journal of Physics*. — 2018. — Vol. 48, No. 6. — P. 576–584.
- Ekomasov E. G., Gumerov A. M., Murtazin R. R.* Interaction of sine-Gordon solitons in the model with attracting impurities // *Mathematical Methods in the Applied Sciences*. — 2016. — Vol. 40, No. 17. — P. 6178–6186.
- Ekomasov E. G., Murtazin R. R., Nazarov V. N.* Excitation of magnetic inhomogeneities in three layer ferromagnetic structure with different parameters of the magnetic anisotropy and exchange // *J. Magn. Magn. Mater.* — 2015. — Vol. 385. — P. 217–221.
- Fabian A. L., Kohl R., Biswas A.* Perturbation of topological solitons due to sine-Gordon equation and its type // *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*. — 2009. — Vol. 14, No. 4. — P. 1227–1244.
- Ferreira L. A., Piette B., Zakrzewski W. J.* Wobbles and other kink–breather solutions of the sineGordon model // *Phys. Rev. E*. — 2008. — Vol. 77, No. 3. — P. 036613.
- Gonzalez J. A., Bellorin A., Garcia-Nustes M. A., Guerrero L. E., Jimenez S., Vazquez L.* Arbitrarily large numbers of kink internal modes in inhomogeneous sine-Gordon equations // *Phys. Lett. A*. — 2017. — Vol. 381, No. 24. — P. 1995–1998.
- Gumerov A. M., Ekomasov E. G., Kudryavtsev R. V., Fakhretdinov M. I.* Excitation of large amplitude localized nonlinear waves by the interaction of kinks of the sine-Gordon equation with attracting impurity // *Russian Journal of Nonlinear Dynamics*. — 2019. — Vol. 15, No. 1. — P. 21–34.
- Kalbermann G.* The sine-Gordon wobble // *J. Phys. A: Math. Gen.* — 2004. — Vol. 37, No. 48. — P. 11603–11612.
- Kivshar Yu. S., Pelinovsky D. E., Cretegny T., Peyrard M.* Internal modes of solitary waves // *Phys. Rev. Lett.* — 1998. — Vol. 80, No. 23. — P. 5032–5035.
- Lizunova M. A., Kager J., Lange S., Wezel J.* Kinks and realistic impurity models in φ^4 -theory // *International Journal of Modern Physics B*. — 2022. — Vol. 36, No. 5. — P. 2250042.
- Saadatmand D., Dmitriev S. V., Borisov D. I., Kevrekidis P. G.* Interaction of sine-Gordon kinks and breathers with a parity-time-symmetric defect // *Phys. Rev. E*. — 2014. — Vol. 90, No. 5. — P. 052902.

УДК: 681.5

Влияние хвостовых плавников робота, приводимого в движение внутренними подвижными массами

А. В. Клековкин^{1,a}, Ю. Л. Караваев^{2,b}, А. А. Килин^{3,c}, А. В. Назаров^{2,d}

¹Ярославский государственный университет им. П. Г. Демидова,
Россия, 150003, г. Ярославль, ул. Советская, д. 14

²Ижевский государственный технический университет им. М. Т. Калашникова,
Россия, 426069, г. Ижевск, ул. Студенческая, д. 7

³Уральский математический центр, Удмуртский государственный университет,
Россия, 426034, г. Ижевск, ул. Университетская, д. 1

E-mail: ^a a.v.klekovkin@istu.ru, ^b karavaev_yury@istu.ru, ^c kilin@rcd.ru, ^d antonnaz14@gmail.com

Получено 23.04.2024, после доработки — 21.06.2024.

Принято к публикации 11.07.2024.

В данной работе представлено описание конструкции водного робота, движущегося по поверхности жидкости и приводимого в движение двумя внутренними подвижными массами. Корпус водного робота в сечении имеет форму симметричного крылового профиля с острой кромкой. На данном прототипе две внутренние массы перемещаются по окружностям и приводятся во вращение за счет одного двигателя постоянного тока и зубчатого механизма, передающего вращательный момент от двигателя к каждой массе. В качестве управляющего воздействия используются угловые скорости подвижных масс, а разработанная кинематическая схема передачи вращения от двигателя к подвижным массам позволяет реализовать вращение двух масс с равными по модулю угловыми скоростями, но при этом разным направлением вращения. А также на корпус данного робота имеется возможность устанавливать дополнительные хвостовые плавники различных форм и размеров. Также в работе для данного объекта представлены уравнения движения, записанные в форме уравнений Кирхгофа для движения твердого тела в идеальной жидкости, дополненные слагаемыми вязкого сопротивления. Представлено математическое описание дополнительных сил, действующих на гибкий хвостовой плавник. С разработанным прототипом робота проведены экспериментальные исследования по влиянию различных хвостовых плавников на скорость передвижения в жидкости. В данной работе на робота устанавливались хвостовые плавники одной формы и размеров, при этом обладающие разной жесткостью. Эксперименты проводились в бассейне с водой, над которым устанавливалась камера, на которую были получены видеозаписи всех экспериментов. Дальнейшая обработка видеозаписей позволила получить перемещения объекта, а также его линейные и угловые скорости. В работе показано различие в развиваемых роботом скоростях при движении без хвостового плавника, а также с хвостовыми плавниками, имеющими разную жесткость. Приведено сравнение развиваемых роботом скоростей, полученных в экспериментальных исследованиях, с результатами математического моделирования системы.

Ключевые слова: мобильный робот, водный робот, моделирование движения, экспериментальные исследования

Математическая модель водного робота разработана А. А. Килиным в Уральском математическом центре (соглашение № 075-02-2024-1445). Расчет гидродинамических сил, действующих на гибкий хвост, разработка конструкции хвостовых плавников выполнены А. В. Клековкиным в рамках гранта Российского научного фонда № 21-71-30011 (<https://rscf.ru/project/21-71-30011/>). Разработка экспериментального прототипа и проведение экспериментальных исследований выполнены Ю. Л. Караваевым в рамках государственного задания Минобрнауки России (FZZN-2020-0011) и А. В. Назаровым.

© 2024 Антон Владимирович Клековкин, Юрий Леонидович Караваев, Александр Александрович Килин, Антон Вячеславович Назаров

Статья доступна по лицензии Creative Commons Attribution-NoDerivs 3.0 Unported License.
Чтобы получить текст лицензии, посетите веб-сайт <http://creativecommons.org/licenses/by-nd/3.0/> или отправьте письмо в Creative Commons, PO Box 1866, Mountain View, CA 94042, USA.

UDC: 681.5

The influence of tail fins on the speed of an aquatic robot driven by internal moving masses

A. V. Klekovkin^{1,a}, Yu. L. Karavaev^{2,b}, A. A. Kilin^{3,c}, A. V. Nazarov^{2,d}

¹P. G. Demidov Yaroslavl State University,
14 Sovetskaya st., Yaroslavl, 150003, Russia

²Kalashnikov Izhevsk State Technical University,
7 Studencheskaya st., Izhevsk, 426069, Russia

³Ural Mathematical Center, Udmurt State University,
1 Universitetskaya st., Izhevsk, 426034, Russia

E-mail: ^a a.v.klekovkin@istu.ru, ^b karavaev_yury@istu.ru, ^c kilin@rcd.ru, ^d antonnaz14@gmail.com

Received 23.04.2024, after completion — 21.06.2024.

Accepted for publication 11.07.2024.

This paper describes the design of an aquatic robot moving on the surface of a fluid and driven by two internal moving masses. The body of the aquatic robot in cross section has the shape of a symmetrical airfoil with a sharp edge. In this prototype, two internal masses move in circles and are rotated by a single DC motor and a gear mechanism that transmits torque from the motor to each mass. Angular velocities of moving masses are used as a control action, and the developed kinematic scheme for transmitting rotation from the motor to the moving masses allows the rotation of two masses with equal angular velocities in magnitude, but with a different direction of rotation. It is also possible to install additional tail fins of various shapes and sizes on the body of this robot. Also in the work for this object, the equations of motion are presented, written in the form of Kirchhoff equations for the motion of a solid body in an ideal fluid, which are supplemented by terms of viscous resistance. A mathematical description of the additional forces acting on the flexible tail fin is presented. Experimental studies on the influence of various tail fins on the speed of motion in the fluid were carried out with the developed prototype of the robot. In this work, tail fins of the same shape and size were installed on the robot, while having different stiffness. The experiments were carried out in a pool with water, over which a camera was installed, on which video recordings of all the experiments were obtained. Next processing of the video recordings made it possible to obtain the object's movements coordinates, as well as its linear and angular velocities. The paper shows the difference in the velocities developed by the robot when moving without a tail fin, as well as with tail fins having different stiffness. The comparison of the velocities developed by the robot, obtained in experimental studies, with the results of mathematical modeling of the system is given.

Keywords: mobile robot, aquatic robot, motion simulation, experimental investigations

Citation: *Computer Research and Modeling*, 2024, vol. 16, no. 4, pp. 869–882 (Russian).

The mathematical model of the aquatic robot was developed by A. A. Kilin at the Ural Mathematical Center (Agreement No. 075-02-2024-1445). The calculation of hydrodynamic forces acting on the flexible tail, the design of the tail fins were carried out by A. V. Klekovkin within the framework of the grant of the Russian Science Foundation (project No. 21-71-30011, <https://rscf.ru/en/project/21-71-30011/>). The development of an experimental prototype and experimental research were carried out by Yu. L. Karavaev within the framework of the state assignment of the Ministry of Education and Science of Russia FZZN-2020-0011 and A. V. Nazarov.

Введение

В настоящее время активно развиваются различные робототехнические системы для перемещения в жидкости, выполняющие большой список задач: мониторинг окружающей среды, исследование дна водоемов, спасательные операции, изучение животного и растительного подводного мира [Antonelli, 2014].

Наиболее популярным движителем среди мобильных роботов, перемещающихся в водной среде, является гребной винт, но также существуют конструкции, использующие движители, представленные в живой природе, — бионические движители [Chu et al., 2012; Castano, Xiaobo, 2019; Triantafyllou, Triantafyllou, Yue, 2000; Wang et al., 2014; Эладави, Караваев, 2023; Zou et al., 2024; Guvernyuk et al., 2020].

Наряду с бионическими существуют более экзотические типы движителей, не представленные в живой природе, но тем не менее позволяющие перемещаться в водной среде. К этой группе можно отнести движение за счет механизмов, находящихся внутри оболочки робота [Bolotnik, Figurina, Chernous'ko, 2012; Borisov, Vetchanin, Kilin, 2017; Borisov, Mamaev, Vetchanin, 2018; Ivanov, 2021; Mamaev, Vetchanin, 2018; Mamaev, Tenenev, Vetchanin, 2018]. Разработка подобных механизмов основана на результатах теоретических исследований, полученных в работах [Козлов, Рамоданов, 2001; Козлов, Онищенко, 2003], доказавших возможность движения профиля, обладающего анизотропией присоединенных масс, при периодическом изменении положения центра масс системы и/или внутреннего кинетического момента. Теоретические исследования получили экспериментальное подтверждение на прототипах [Childress, Spagnolie, Tokieda, 2011; Vetchanin, Kilin, 2016; Vorochaeva, Jatsun, 2011; Klenov, Kilin, 2016; Килин, Кленов, Тененев, 2018; Karavaev, Kilin, Klekovkin, 2016; Pollard, Tallapragada, 2016; Karavaev, 2022; Klimina et al., 2023]. У данных типов роботов основным преимуществом является возможность полной герметизации оболочки, так как внешние подвижные элементы отсутствуют, что в свою очередь позволяет получить более простую конструкцию робота. Однако эффективность движения роботов с подобными движителями существенно меньше других типов движителей. Поэтому актуальным направлением исследований является объединение различных принципов передвижения.

В данной работе представлен реальный прототип водного робота, который объединяет два вышеописанных типа движителя: бионический и движитель, основанный на перемещении внутренних масс. Данный прототип движется за счет вращения двух масс, находящихся внутри оболочки, а также имеется возможность добавить к корпусу пассивный гибкий хвостовой плавник. При такой конструкции все приводные механизмы находятся внутри оболочки робота и с жидкостью не взаимодействуют, однако при движении хвостовой плавник начинает изгибаться и появляются дополнительные гидродинамические силы, влияющие на продвижение робота. Так как движение робота осуществляется по поверхности жидкости, действительное трехмерное движение робота аппроксимируем плоскопараллельным.

Уравнения движения

Рассмотрим плоскопараллельное движение тела в жидкости, оболочка которого в сечении является симметричным крыловидным профилем. Для описания движения введем две системы координат: неподвижную (инерциальную) $O'x$ и подвижную, жестко связанную с телом, Ox_1x_2 , начало которой находится в центре масс робота, ось Ox_2 направлена к лобовой части робота. Положение точки O определяется радиус-вектором $\mathbf{r} = (x, y)^T$ в неподвижной системе координат, а угол поворота между положительными направлениями осей Ox_1 и $O'x$ обозначим как α , положительное направление которого отсчитывается против часовой стрелки. Схематичное изображение робота с обозначением систем координат показано на рис. 1.

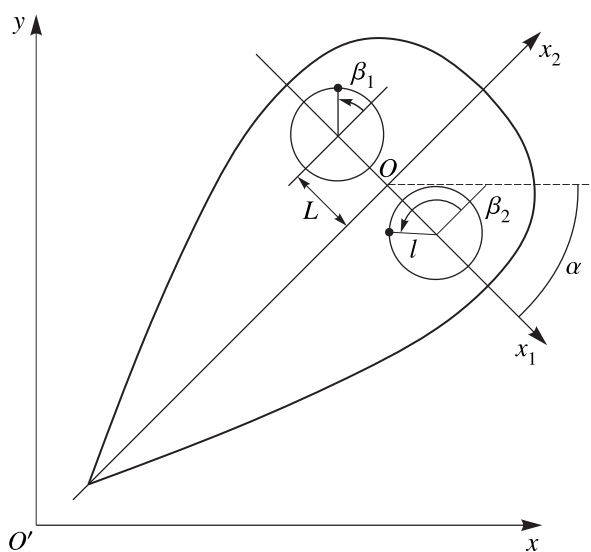


Рис. 1. Схематичное изображение водного робота, приводимого в движение внутренними подвижными массами, где $O'xy$ и Ox_1x_2 — неподвижная и подвижная системы координат соответственно, α — угол поворота подвижной системы координат относительно неподвижной, β_1 и β_2 — углы поворота подвижных масс, l — радиус окружности, по которой вращаются подвижные массы, а L — расстояние от центра этих окружностей до оси Ox_2

При описании движения корпус робота считаем недеформируемым, а силы и моменты сил, возникающие при движении гибкого хвоста, будут рассмотрены отдельно и учтены в модифицированной модели далее.

Для описания движения введем вектор квазискоростей $\mathbf{w} = (v_1, v_2, \omega)^T$, где v_1 и v_2 обозначают проекции линейной скорости центра масс робота на подвижные оси, а ω — угловая скорость тела. Тогда можно записать следующие кинематические соотношения:

$$\dot{x} = v_1 \cos \alpha - v_2 \sin \alpha, \quad \dot{y} = v_1 \sin \alpha + v_2 \cos \alpha, \quad \dot{\alpha} = \omega. \quad (1)$$

Введем радиус-векторы $\mathbf{r}_i$, определяющие положение i -й массы, $i = 1, 2$. В проекции на подвижную систему координат данные векторы имеют вид $\mathbf{r}_i = (r_{ix}, r_{iy})^T = (l \cos \beta_i \pm L, l \sin \beta_i)^T$. Тогда скорости подвижных масс в подвижной системе координат запишутся как $\dot{\mathbf{r}}_i = (\dot{r}_{ix}, \dot{r}_{iy})^T = (-l \sin \beta_i \dot{\beta}_i, l \cos \beta_i \dot{\beta}_i)^T$.

Движение твердого тела в жидкости при отсутствии внешних сил можно описать уравнениями Кирхгофа, дополненными слагаемыми вязкого сопротивления:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \frac{\partial T}{\partial v_1} &= \omega \frac{\partial T}{\partial v_2} - c_1 v_1 |v_1|, & \frac{d}{dt} \frac{\partial T}{\partial v_2} &= -\omega \frac{\partial T}{\partial v_1} - c_2 v_2 |v_2|, \\ \frac{d}{dt} \frac{\partial T}{\partial \omega} &= v_2 \frac{\partial T}{\partial v_1} - v_1 \frac{\partial T}{\partial v_2} - c_3 \omega |\omega|, \end{aligned} \quad (2)$$

где T — кинетическая энергия системы, c_1, c_2, c_3 — коэффициенты вязкого сопротивления. В данных уравнениях для описания сил сопротивления используется квадратичная зависимость по скоростям. В работе [Klekovkin, Karavaev, Mamaev, 2023] показано, что моделирование с использованием квадратичного сопротивления качественно совпадает с реальным экспериментом (в отличие от линейной модели сопротивления).

Для данного объекта кинетическая энергия состоит из трех компонентов:

$$T = T_f + T_b + T_m,$$

где T_f — кинетическая энергия жидкости, T_b — кинетическая энергия оболочки, T_m — кинетическая энергия подвижных масс.

При рассмотрении плоскопараллельного движения тела в жидкости кинетическая энергия будет иметь вид

$$T = \frac{1}{2}((\lambda_{11} + m_b)v_1^2 + (\lambda_{22} + m_b)v_2^2 + (\lambda_{33} + I_b)\omega^2 + 2\lambda_{23}v_2\omega) + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^2 m_i ((\dot{r}_{xi} + v_1 - \omega r_{yi})^2 + (\dot{r}_{yi} + v_2 + \omega r_{xi})^2), \quad (3)$$

где λ_{ij} — коэффициенты присоединенных масс, I_b — момент инерции корпуса робота относительно вертикальной оси, проходящей через точку O . Рассматриваемая модель робота имеет две одинаковые подвижные массы в виде эксцентриков, с массой m .

Записав кинетическую энергию (3) и подставив в уравнения (2), получим уравнения движения:

$$\mathbf{A}(\mathbf{w})\dot{\mathbf{w}} + \mathbf{B}(\mathbf{w})\mathbf{w} + \mathbf{C}(\mathbf{w})\mathbf{w} + \mathbf{d} = 0, \quad (4)$$

где матрицы $\mathbf{A}(\mathbf{w})$, $\mathbf{B}(\mathbf{w})$ и $\mathbf{C}(\mathbf{w})$ и вектор $\mathbf{d}$ имеют вид

$$\mathbf{A}(\mathbf{w}) = \begin{pmatrix} a_1 & 0 & f \\ 0 & a_2 & g \\ f & g & a_3 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{B}(\mathbf{w}) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & b_{13} \\ 0 & 0 & b_{23} \\ b_{31} & b_{32} & b_{33} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{C}(\mathbf{w}) = \begin{pmatrix} c_1|v_1| & 0 & 0 \\ 0 & c_2|v_2| & 0 \\ 0 & 0 & c_3|\omega| \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{d} = \begin{pmatrix} -ml(\cos\beta_1\ddot{\beta}_1^2 + \cos\beta_2\ddot{\beta}_2^2 + \sin\beta_1\ddot{\beta}_1 + \sin\beta_2\ddot{\beta}_2) \\ -ml(\sin\beta_1\ddot{\beta}_1^2 + \sin\beta_2\ddot{\beta}_2^2 - \cos\beta_1\ddot{\beta}_1 - \cos\beta_2\ddot{\beta}_2) \\ -ml(-L\cos\beta_1\ddot{\beta}_1^2 + L\cos\beta_2\ddot{\beta}_2^2 - L\sin\beta_1\ddot{\beta}_1 + L\sin\beta_2\ddot{\beta}_2 - l\ddot{\beta}_1 - l\ddot{\beta}_2) \end{pmatrix},$$

$$a_1 = m_b + 2m + \lambda_{11}, \quad a_2 = m_b + 2m + \lambda_{22}, \quad a_3 = I_b + 2m(l^2 + L^2) + \lambda_{33} + 2mL(\sin\beta_1 - \sin\beta_2),$$

$$f = -ml(\sin\beta_1 + \sin\beta_2), \quad g = ml(\cos\beta_1 + \cos\beta_2) + \lambda_{23},$$

$$b_{13} = -2ml(\cos\beta_1\dot{\beta}_1 + \cos\beta_2\dot{\beta}_2) - a_2v_2 - g\omega, \quad b_{23} = -2ml(\sin\beta_1\dot{\beta}_1 + \sin\beta_2\dot{\beta}_2) + a_1v_1 + f\omega,$$

$$b_{31} = a_2v_2 + g\omega, \quad b_{32} = -a_1v_1 - f\omega, \quad b_{33} = 2mL(\cos\beta_1\dot{\beta}_1 - \cos\beta_2\dot{\beta}_2).$$

Дополнив полученные уравнения (4) кинематическими соотношениями (1), получаем полную систему уравнений, описывающих движение рассматриваемого объекта.

Далее при моделировании коэффициенты вязкого сопротивления c_1 , c_2 , c_3 и коэффициенты присоединенных масс λ_{ij} для рассматриваемого недеформируемого профиля с учетом хвоста определялись по методике, описанной в работе [Karavaev et al., 2021], и при моделировании принимались равными

$$\lambda_{11} = 0,451, \quad \lambda_{22} = 2,961, \quad \lambda_{33} = 0,013, \quad \lambda_{23} = 0,119,$$

$$c_1 = 3,407, \quad c_2 = 1,132, \quad c_3 = 0,028.$$

А силы, возникающие при движении гибкого хвоста, определялись в рамках подходов, используемых при моделировании движения бионических водных роботов и рыб.

Расчет гидродинамических сил, действующих на гибкий хвост

Рассматривая хвост как гибкое тело, присоединенное к корпусу робота, силы, действующие на него со стороны жидкости, можно определить, используя теорию Лайтхила [Lighthill, 1971; Wang, Tan, 2013]. Введем параметр τ , который определяет точку на хвосте, причем $\tau = 0$ —

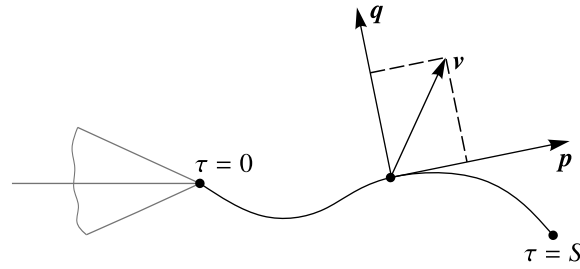


Рис. 2. Схематичное изображение гибкого хвостового плавника, где τ — параметр, определяющий точку на хвосте с длиной S ; p и q — единичные касательный и нормальный векторы в точке τ соответственно, v — вектор скорости точки τ

точка крепления хвоста к корпусу робота, а $\tau = S$ — конец хвоста, где S — длина хвоста (см. рис. 2).

Если известны функции $X(\tau, t)$, $Y(\tau, t)$, определяющие координаты каждой точки хвоста в системе координат, связанной с роботом, тогда в каждой точке τ для каждого момента времени движения t можно определить касательный и нормальный единичные векторы к кривой, определяющей форму хвоста:

$$p = \left(\frac{\partial X}{\partial \tau}, \frac{\partial Y}{\partial \tau} \right)^T, \quad q = \left(-\frac{\partial Y}{\partial \tau}, \frac{\partial X}{\partial \tau} \right)^T.$$

Вектор скорости данной точки запишется как $v = \left(\frac{\partial X}{\partial t}, \frac{\partial Y}{\partial t} \right)^T$. А в проекции на оси подвижной системы координат компоненты данной скорости будут иметь вид

$$v_{\parallel} = \frac{\partial X}{\partial t} \frac{\partial X}{\partial \tau} + \frac{\partial Y}{\partial t} \frac{\partial Y}{\partial \tau}, \quad v_{\perp} = \frac{\partial Y}{\partial t} \frac{\partial X}{\partial \tau} - \frac{\partial X}{\partial t} \frac{\partial Y}{\partial \tau}.$$

Тогда, согласно [Lighthill, 1971; Wang, Tan, 2013], сила, действующая на хвост со стороны жидкости в данной точке, равна

$$f(\tau) = -m_v \frac{d}{dt}(v_{\perp} q),$$

а гидродинамическая сила в конце хвоста (при $\tau = S$) имеет вид

$$F_S = -\frac{1}{2} m_v v_{\perp}^2 p + m_v v_{\perp} v_{\parallel} q,$$

где m_v — виртуальная масса, которая вычисляется на единицу длины как $m_v = \frac{1}{4} \pi \rho_w d(\tau)^2$, где $d(\tau)$ — высота части хвоста в точке τ , находящейся в жидкости, ρ_w — плотность жидкости. В зависимости от формы хвоста величина $d(\tau)$ может быть как константой, так и функцией от τ .

Тогда общая сила, действующая на гибкий хвост со стороны жидкости, вычисляется как

$$F_h = \int_0^L f(\tau) d\tau + F_S. \quad (5)$$

А гидродинамический момент, действующий на хвост относительно центра масс робота, будет равен

$$M_h = \int_0^L r_{\tau} \times f(\tau) d\tau + r_S \times F_S, \quad (6)$$

где r_{τ} и r_S — радиус-векторы от центра масс робота до соответствующих точек хвоста.

Так как рассматривается плоскопараллельное движение, вектор силы, действующей со стороны жидкости, будет иметь вид $\mathbf{F}_h = (F_{hx}, F_{hy}, 0)^T$, а вектор момента — $\mathbf{M}_h = (0, 0, M_h)^T$. Для учета полученных сил, действующих на хвост, добавим к уравнениям движения (4) вектор обобщенных сил $\mathbf{Q} = (F_{hx}, F_{hy}, M_h)^T$. Тогда уравнения движения (4) можно переписать как

$$\mathbf{A}(\mathbf{w})\dot{\mathbf{w}} + \mathbf{B}(\mathbf{w})\mathbf{w} + \mathbf{C}(\mathbf{w})\mathbf{w} + \mathbf{d} + \mathbf{Q} = 0. \quad (7)$$

Уравнение (7) описывает динамику рассматриваемой системы, при этом в качестве управления выступают угловые скорости подвижных масс $\dot{\beta}_1, \dot{\beta}_2$.

Описание конструкции

Для проверки математической модели разработан экспериментальный прототип водного робота. Корпус робота имеет форму крыловидного профиля с габаритными размерами $240 \times 190 \times 60$ мм (без хвоста). Корпус изготовлен на 3D-принтере из PLA-пластика с толщиной стенки 2 мм. Внутри корпуса расположены две подвижные массы, перемещение которых вызывает изменение центра масс системы. Фото прототипа робота представлено на рис. 3.

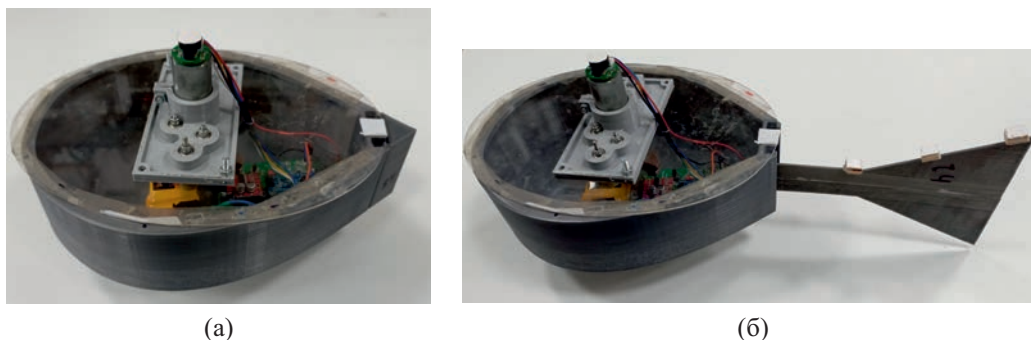


Рис. 3. Прототип разработанного робота: а) с хвостом, дополняющим форму корпуса робота до крыловидного профиля; б) с установленным гибким хвостом

Траектории движения масс представляют собой окружности, лежащие в одной плоскости, центры окружностей равноудалены от оси симметрии профиля корпуса. Массы приводятся в движение от одного двигателя постоянного тока через систему зубчатых передач. Фото данного механизма представлено на рис. 4. Характеристики двигателя представлены в таблице 1.

Таблица 1. Характеристики мотор-редуктора, приводящего в движение подвижные массы

Характеристика	Значение
Номинальное напряжение питания	12 В
Передаточное отношение редуктора	9,7 : 1
Момент на валу	0,17 Нм
Максимальная скорость вращения	800 RPM
Ток холостого хода	0,2 А
Максимальный ток	1,8 А

Зубчатый механизм на данном роботе разработан идентичным механизму, описанному в работе [Klenov, Kilin, 2016], который использовался при движении робота, имеющего в сечении форму эллиптического цилиндра. Данный зубчатый механизм от выходного вала мотор-редуктора к оси подвижной массы имеет передаточное отношение 1 : 1 и обеспечивает вращение подвижных масс по окружностям с угловыми скоростями, равными по модулю, но с разными

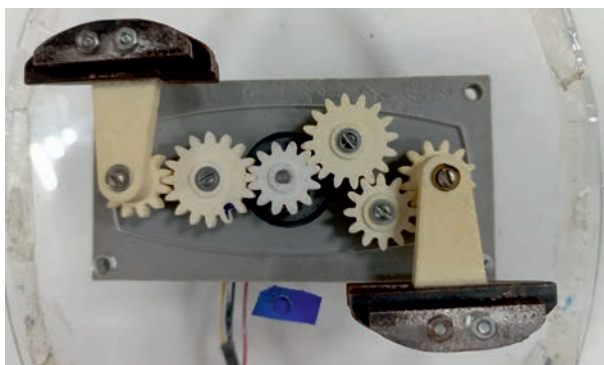


Рис. 4. Фото зубчатого механизма для передачи вращения от двигателя к подвижным массам

знаками. При таком способе вращения масс зависимости углов, определяющих положение каждой массы, от времени можно записать так:

$$\beta_1 = 2\pi ft - \frac{\pi}{2}, \quad \beta_2 = -2\pi ft - \frac{\pi}{2}, \quad (8)$$

где f — частота вращения подвижных масс.

Значения параметров прототипа, входящие в уравнения движения (7), представлены в таблице 2.

Таблица 2. Массогеометрические параметры прототипа водного робота

Характеристика	Обозначение	Значение
Масса корпуса робота	m_b	0,61 кг
Момент инерции корпуса робота	I_b	0,0053 кг · м ²
Масса подвижного груза	m	0,07 кг
Радиус вращения подвижной массы	l	0,04 м
Расстояние от центра масс робота до центра окружности, по которой вращаются массы	L	0,045 м

Конструкция робота предусматривает установку хвостовых плавников различной формы, размеров и жесткости. Фото хвостовых плавников, устанавливаемых на робота в рамках текущего исследования, представлено на рис 5, а. Например, при установке хвоста, представленного на рис. 3, а, форма корпуса робота приобретает законченную форму крыловидного профиля с острой кромкой. С данным хвостом не возникает дополнительных сил, связанных с гибкостью хвоста, то есть $Q = 0$. Остальные хвосты изготовлены так, что имеют одинаковые размеры, но при этом разную жесткость и вносят дополнительный вклад в движение робота. При моделировании движения робота с этими хвостами необходимо учитывать дополнительные силы, действующие на хвост, вследствие его колебаний во время движения, то есть $Q \neq 0$. Все используемые хвосты были изготовлены на 3D-принтере, размеры приведены на рис. 5, б.

При закреплении хвоста к корпусу робота имеется возможность регулировать высоту установки хвоста. При проведении экспериментов каждый из хвостов устанавливался так, чтобы хвост находился в жидкости на половину своей высоты.

Экспериментальные исследования

Разработанная конструкция водного робота позволяет реализовать движение за счет согласованного перемещения двух внутренних масс, угловые скорости которых являются управляющими воздействиями. Главной задачей экспериментальных исследований, помимо верификации

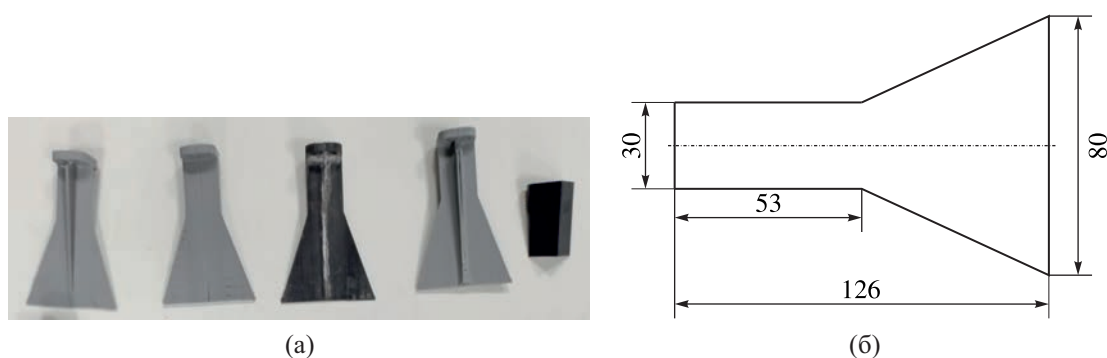


Рис. 5. а) Фото хвостовых плавников, используемых при проведении экспериментов. б) Размеры хвостового плавника (указаны в мм)

разработанной модели движения, является оценка влияния размеров гибкого хвоста и его жесткости на скорость движения. Поэтому во всех экспериментах угловые скорости подвижных масс были постоянными и равными 54 рад/с, что является максимальной скоростью вращения для разработанного прототипа.

Все экспериментальные траектории, представленные в данном разделе, являются средними траекториями движения робота, построенными по пяти экспериментам, проведенным с одинаковыми условиями.

Теоретические траектории были получены при помощи численного решения системы дифференциальных уравнений (7), дополненных кинематическими соотношениями (1). В эксперименте движение робота осуществлялось из состояния покоя. Согласно работе [Vetchanin, Kilin, 2016] такому движению соответствует движение на нулевом уровне первых интегралов:

$$\frac{\partial T}{\partial v_1} = \frac{\partial T}{\partial v_2} = 0, \quad \frac{\partial T}{\partial \omega} = 0,$$

из которых определялись начальные условия для решения дифференциальных уравнений.

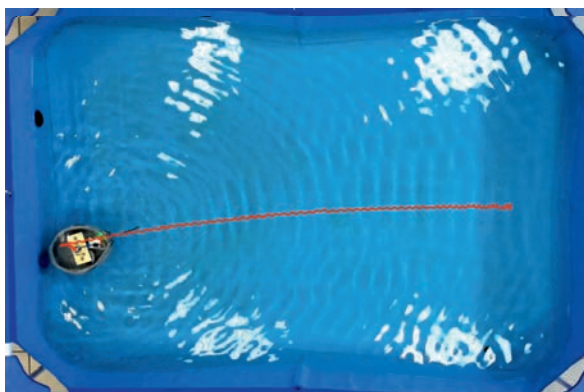
Методика проведения экспериментов

Эксперименты проводились в бассейне размерами 2 × 1,2 метра. Траектория движения робота отслеживалась с помощью камеры Brio Ultra HD Pro. Данная камера обеспечивает съемку с частотой 30 кадров в секунду. Запись видео производилась в программном обеспечении Logitech Capture, а отслеживание объектов на видео — с помощью специального программного обеспечения для отслеживания маркеров, установленных на корпусе робота.

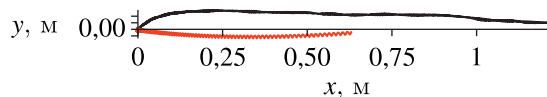
Для исключения шумов все данные были обработаны сглаживающим фильтром Савицкого–Голея [Savitzky, Golay, 1964]. Типовая траектория движения, восстановленная с помощью системы захвата движения и наложенная на кадр с видеозаписи в бассейне, представлена на рис. 6, а.

Движение без гибкого хвоста

В этом случае на робота в качестве сменного хвостового модуля устанавливается модуль, при котором форма корпуса робота принимает вид крылового профиля с острой кромкой. При вращении подвижных масс с постоянной скоростью робот движется в среднем по прямой линии. Графики экспериментальной и теоретической траекторий представлены на рис. 6, б. Средняя скорость движения в моделировании составила 0,018 м/с, а в эксперименте — 0,023 м/с. В работе [Klenov, Kilin, 2016], где рассматривался водный робот, приводящийся в движение подобным механизмом, но имеющий форму эллиптического цилиндра, в экспериментах при аналогичной



(а)



(б)

Рис. 6. а) Кадр с траекторией движения. б) Теоретическая (красная) и экспериментальная (черная) траектория движения водного робота для движения без гибкого хвоста

скорости вращения подвижных масс была достигнута скорость перемещения в 0,01 м/с. Результат текущей работы показывает, что форма робота в виде крыловидного профиля позволяет достигать больших скоростей продвижения в жидкости роботов, управляемых перемещением внутренних масс.

Движение с гибким хвостом

Далее рассмотрим аналогичные эксперименты, при которых на робота устанавливались различные хвосты.

Для оценки сил, действующих на тело вследствие гибкого хвоста, необходимо знать функции $X(\tau, t)$, $Y(\tau, t)$, определяющие координаты каждой точки хвоста. В работе [Mazlan, McGookin, 2012] показано, что при небольшой амплитуде колебания можно использовать следующую аналитическую форму:

$$X(\tau, t) = \tau, \quad Y(\tau, t) = (k_1 \tau + k_2 \tau^2) \sin(k_3 \tau + 2\pi f t), \quad (9)$$

где коэффициенты k_1 , k_2 , k_3 задают амплитуду колебаний и форму изгиба гибкого хвоста.

В данной работе эти коэффициенты мы получили, анализируя кадры видеозаписи экспериментов. При проведении экспериментов дополнительно на хвост устанавливалось три маркера (в точке крепления хвоста к корпусу и далее, в средней и конечной части хвоста). Далее, полученные координаты точек хвостов аппроксимировались функцией (9) и находились значения k_1 , k_2 , k_3 . Аппроксимация производилась в пакете Curve Fitting программного обеспечения MATLAB.

Функция $d(\tau)$, которая определяет высоту части хвоста в точке τ , находящейся в жидкости, для данной формы хвоста рассчитывалась следующим образом:

$$d(\tau) = \begin{cases} \tau < 53, & d = 15; \\ 53 \leq \tau \leq 126, & d = 15 + 0,205(\tau - 53). \end{cases}$$

Для оценки влияния жесткости хвоста на скорость продвижения в жидкости были проведены эксперименты с хвостами одной формы и размеров, но с разной жесткостью. Жесткость хвоста изменялась путем варьирования толщины хвоста и добавления к нему ребер жесткости. Степень жесткости хвоста оценим параметром максимальной амплитуды отклонения конечной точки хвоста в экспериментах при одних и тех же колебаниях корпуса. В таблице 3 представлены

значения максимальной амплитуды отклонения конечной точки хвоста — A , а также аналитическая форма записи функции $Y(\tau, t)$, задающей изменение формы хвоста, которая используется в моделировании.

Таблица 3. Параметры хвостов с разной жесткостью, для которых проводились эксперименты

Номер	A , м	$Y(\tau, t)$
1	$A_1 = 0,0200$ м	$Y(\tau, t) = (0,15\tau + 0,20\tau^2) \sin(3\tau + 2\pi ft)$
2	$A_2 = 0,0030$ м	$Y(\tau, t) = (0,02\tau + 0,04\tau^2) \sin(1\tau + 2\pi ft)$
3	$A_3 = 0,0015$ м	$Y(\tau, t) = (0,01\tau + 0,02\tau^2) \sin(0,5\tau + 2\pi ft)$
4	$A_4 = 0,0010$ м	$Y(\tau, t) = (0,007\tau + 0,01\tau^2) \sin(0,4\tau + 2\pi ft)$

Средняя скорость движения робота с каждым из хвостов, полученная в экспериментах и моделировании, представлена в таблице 4, а также на рис. 7. Средняя скорость движения вычислялась как среднее значение проекции вектора скорости на ось Ox_2 , при достижении установившегося значения скорости. Так как робот совершает колебательные движения, средняя скорость вычислялась как расстояние по прямой от точки, в которой находился робот при достижении установившегося значения скорости, до конечной точки деленное на время движения.

Таблица 4. Средняя скорость движения робота с каждым из хвостов

Номер	Экспериментальная средняя скорость, м/с	Теоретическая средняя скорость, м/с
1	0,261	0,0875
2	0,050	0,0150
3	0,038	0,0125
4	0,032	0,0120

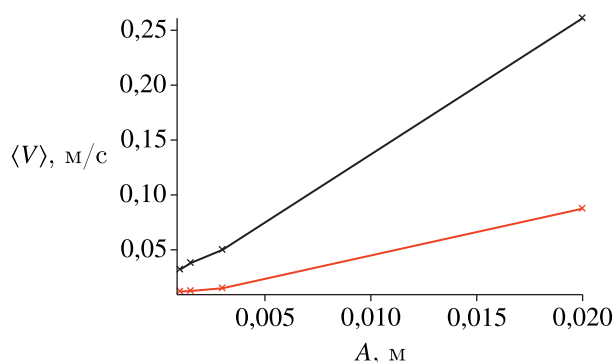


Рис. 7. Средняя скорость движения робота $\langle V \rangle$ в зависимости от амплитуды колебания хвостового плавника A , полученная в экспериментах (черная линия) и моделировании (красная линия)

Из полученных данных видно, что для первого хвоста амплитуда колебаний и, соответственно, скорость движения существенно превышают аналогичные значения для других хвостов. Рассмотрим этот эксперимент более подробно.

На рис. 8, а представлен график зависимости проекции скорости движения робота на ось Ox_2 . Данная проекция показывает скорость движения робота по направлению вперед без учета колебательных перемещений.

Графики экспериментальной и теоретической траекторий представлены на рис. 8, б. Средняя скорость движения в моделировании составила 0,0875 м/с, а в эксперименте — 0,261 м/с.

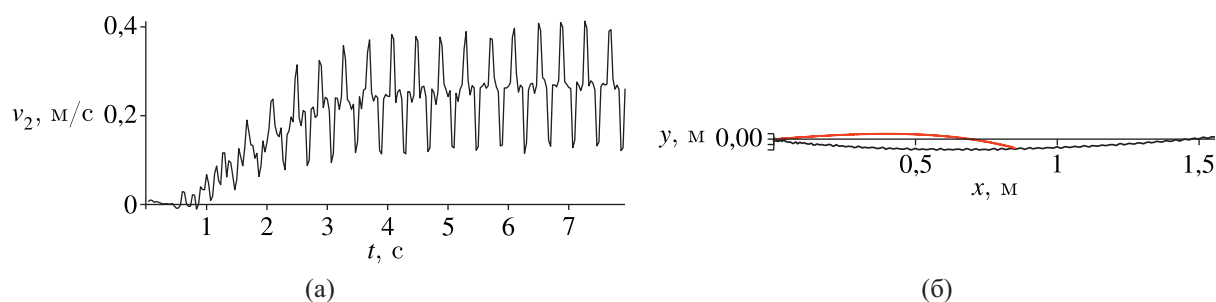


Рис. 8. а) График проекции скорости движения робота на ось $Ox_2 - v_2$. б) Теоретическая (красная) и экспериментальная (черная) траектории движения водного робота для движения с гибким хвостом

Полученные скорости движения значительно превышают скорость движения без гибкого хвоста, что указывает на то, что гидродинамические силы, действующие на гибкий хвост, существенно повышают эффективность движения. При близкой к 0 амплитуде колебания хвоста динамика системы близка к движению без хвоста, которое описано в работах [Klenov, Kilin, 2016; Килин, Кленов, Тененев, 2018; Karavaev et al., 2021]. В данных работах используется похожий подход к выводу уравнений движения, и скорости движения, полученные в моделировании, имеют меньшее значение, чем скорости движения в эксперименте. Похожих результатов удалось достичь в настоящем исследовании. Это говорит о том, что при движении в жидкости на тело действуют дополнительные силы, помогающие движению; это могут быть силы, связанные с потоком жидкости вокруг тела, возникающим при движении, а также силы, связанные с возникновением вихревых структур, сходящих с острой кромки хвоста. При моделировании можно учесть эти дополнительные факторы [Tallapragada, Kelly, 2013; Kotsur, Shcheglov, Marchevsky, 2022; Shvarts, 2023; Vetchanin, Valieva, 2023].

Заключение

В данной работе показана экспериментальная возможность движения в жидкости робота с формой корпуса в виде крыловидного профиля, перемещающегося за счет вращения двух внутренних масс. Экспериментально установлено, что при одинаковых управляющих воздействиях робот крыловидной формы достигает больших скоростей, чем робот с корпусом в виде эллиптического цилиндра. Также экспериментально показано, что добавление хвостового плавника может увеличить скорость перемещения приблизительно в 10 раз.

В математической модели движения были учтены дополнительные силы, действующие на гибкий хвостовой плавник. Теоретические и экспериментальные результаты качественно согласуются, однако для достижения количественного согласования необходимо учитывать вихреобразование и циркуляцию жидкости вокруг тела [Burmashева, Prosviryakov, 2022; Semernik et al., 2023].

Также в будущем планируется разработать конструкцию подобного робота с независимыми приводами для каждой массы для возможности реализации на практике различных маневров, а не только движения вдоль прямой.

Список литературы (References)

- Килин А. А., Кленов А. И., Тененев В. А. Управление движением тела с помощью внутренних масс в вязкой жидкости // Компьютерные исследования и моделирование. — 2018. — Т. 10, № 4. — С. 445–460.
- Kilin A. A., Klenov A. I., Tenenev V. A. Upravlenie dvizheniem tela s pomoshch'yu vnutrennikh mass v vyazkoi zhidkosti [Controlling the movement of the body using internal masses in a viscous liquid] // Computer Research and Modeling. — 2018. — Vol. 10, No. 4. — P. 445–460 (in Russian).

- Козлов В. В., Онищенко Д. А. О движении в идеальной жидкости тела, содержащего внутри себя подвижную сосредоточенную массу // ПММ. — 2003. — Т. 67, № 4. — С. 620–633.
Kozlov V. V., Onishchenko D. A. The motion in a perfect fluid of a body containing a moving point mass // J. Appl. Math. Mech. — 2003. — Vol. 67, No. 4. — P. 553–564. (Original Russian paper: Kozlov V. V., Onishchenko D. A. O dvizhenii v ideal'noi zhidkosti tela, sodержashchego vnutri sebya podvizhnuyu sosredotochennuyu massu // PMM. — 2003. — Vol. 67, No. 4. — P. 620–633.)
- Козлов В. В., Рамоданов С. М. О движении изменяемого тела в идеальной жидкости // ПММ. — 2001. — Т. 65, № 4. — С. 592–601.
Kozlov V. V., Ramodanov S. M. The motion of a variable body in an ideal fluid // J. Appl. Math. Mech. — 2001. — Vol. 65, No. 4. — P. 579–587. (Original Russian paper: Kozlov V. V., Ramodanov S. M. O dvizhenii izmenyaemogo tela v ideal'noi zhidkosti // PMM. — 2001. — Vol. 65, No. 4. — P. 592–601.)
- Эладави М. А., Караваяев Ю. Л. Анализ конструкций подводных роботов // Вестник ИЖГТУ им. М. Т. Калашникова. — 2023. — Т. 26, № 1. — С. 35–47.
Eladawy M. A., Karavaev Yu. L. Analiz konstruktсии podvodnykh robotov [Analysis of underwater robot designs] // Vestnik IzhGTU im. M. T. Kalashnikova. — 2023. — Vol. 26, No. 1. — P. 35–47 (in Russian).
- Antonelli G. Underwater Robots. — Cham: Springer, 2014. — 279 p.
- Bolotnik N. N., Figurina T. Yu., Chernous'ko F. L. Optimal control of the rectilinear motion of a two-body system in a resistive medium // Journal of Applied Mathematics and Mechanics. — 2012. — Vol. 76, No. 1. — P. 1–14.
- Borisov A. V., Mamaev I. S., Vetchanin E. V. Dynamics of a smooth profile in a medium with friction in the presence of parametric excitation // Regular and Chaotic Dynamics. — 2018. — Vol. 23, No. 4. — P. 480–502.
- Borisov A. V., Vetchanin E. V., Kilin A. A. Control of the motion of a triaxial ellipsoid in a fluid using rotors // Mathematical Notes. — 2017. — Vol. 102, No. 4. — P. 455–464.
- Burmasheva N. V., Prosviryakov E. Yu. Exact solutions to the Navier–Stokes equations for describing the convective flows of multilayer fluids // Rus. J. Nonlin. Dyn. — 2022. — Vol. 18, No. 3. — P. 397–410.
- Castano M. L., Xiaobo T. Model predictive control-based path-following for tail-actuated robotic fish // Journal of Dynamic Systems, Measurement, and Control. — 2019. — Vol. 141, No. 7. — 11 p.
- Childress S., Spagnolie S. E., Tokieda T. A bug on a raft: recoil locomotion in a viscous fluid // J. Fluid Mech. — 2011. — Vol. 669. — P. 527–556.
- Chu W. S., Lee K. T., Song S. H., Han M. W., Lee J. Y., Kim H. S., Kim M. S., Park Y. J., Cho K. J., Ahn S. H. Review of biomimetic underwater robots using smart actuators // International Journal of Precision Engineering and Manufacturing. — 2012. — Vol. 13, No. 7. — P. 1281–1292.
- Guvernyuk S. V., Dynnikov Ya. A., Dynnikova G. Ya., Malakhova T. V. The contribution of added mass force to formation of propulsive force of flapping airfoil in viscous fluid // Technical Physics Letters. — 2020. — Vol. 46, No. 9. — P. 847–850.
- Ivanov A. P. Vibroimpact mobile robot // Rus. J. Nonlin. Dyn. — 2021. — Vol. 17, No. 4. — P. 429–436.
- Karavaev Yu. L. Spherical robots: an up-to-date overview of designs and features // Rus. J. Nonlin. Dyn. — 2022. — Vol. 18, No. 4. — P. 709–750.
- Karavaev Yu. L., Kilin A. A., Klekovkin A. V. Experimental investigations of the controlled motion of a screwless underwater robot // Regular and Chaotic Dynamics. — 2016. — Vol. 21, No. 7–8. — P. 918–926.
- Karavaev Yu. L., Klekovkin A. V., Mamaev I. S., Tenenev V. A., Vetchanin E. V. Simple physical model for control of an propellerless aquatic robot // J. Mechanisms Robotics. — 2021. — Vol. 14, No. 1. — 011007. — 11 p.
- Klekovkin A. V., Karavaev Yu. L., Mamaev I. S. The control of an aquatic robot by a periodic rotation of the internal flywheel // Rus. J. Nonlin. Dyn. — 2023. — Vol. 19, No. 2. — P. 265–279.
- Klenov A. I., Kilin A. A. Influence of vortex structures on the controlled motion of an above-water screwless robot // Regular and Chaotic Dynamics. — 2016. — Vol. 21, No. 7–8. — P. 927–938.

- Klimina L. A., Golovanov S. A., Dosaev M. Z., Selyutskiy Y. D., Holub A. P.* Plane-parallel motion of a trimaran capsobot controlled with an internal flywheel // *International Journal of Non-Linear Mechanics*. — 2023. — Vol. 150. — P. 104341.
- Kotsur O. S., Shcheglov G. A., Marchevsky I. K.* Approximate weak solutions to the vorticity evolution equation for a viscous incompressible fluid in the class of vortex filaments // *Rus. J. Nonlin. Dyn.* — 2022. — Vol. 18, No. 3. — P. 423–439.
- Lighthill M. J.* Large-amplitude elongated-body theory of fish locomotion // *Proc. R. Soc. Lond B.* — 1971. — Vol. 179. — P. 125–138.
- Mamaev I. S., Tenenev V. A., Vetchanin E. V.* Dynamics of a body with a sharp edge in a viscous fluid // *Rus. J. Nonlin. Dyn.* — 2018. — Vol. 14, No. 4. — P. 473–494.
- Mamaev V. A., Vetchanin E. V.* The self-propulsion of a foil with a sharp edge in a viscous fluid under the action of a periodically oscillating rotor // *Regular and Chaotic Dynamics*. — 2018. — Vol. 23, No. 7–8. — P. 875–886.
- Mazlan A. N. A., McGookin E.* Modelling and control of a biomimetic autonomous underwater vehicle // 2012 12th International Conference on Control Automation Robotics & Vision (ICARCV). — IEEE, 2012. — P. 88–93.
- Pollard B., Tallapragada P.* An aquatic robot ropelled by an internal rotor // *IEEE/ASME Transactions on Mechatronics*. — 2016. — Vol. 22, No. 2. — P. 931–939.
- Savitzky A., Golay M. J. E.* Smoothing and differentiation of data by simplified least squares procedures // *Analytical chemistry*. — 1964. — Vol. 36, No. 9. — P. 1627–1639.
- Semernik I. V., Bender O. V., Tarasenko A. A., Samonova C. V.* Analysis and simulation of BER performance of chaotic underwater wireless optical communication systems // *Rus. J. Nonlin. Dyn.* — 2023. — Vol. 19, No. 1. — P. 137–158.
- Shvarts K. G.* Plane-parallel advective flow in a horizontal layer of incompressible permeable fluid // *Rus. J. Nonlin. Dyn.* — 2023. — Vol. 19, No. 2. — P. 219–226.
- Tallapragada P., Kelly S. D.* Dynamics and self-propulsion of a spherical body shedding coaxial vortex rings in an ideal fluid // *Regular and Chaotic Dynamics*. — 2013. — Vol. 18, No. 1–2. — P. 21–32.
- Triantafyllou M. S., Triantafyllou G. S., Yue D. K. P.* Hydrodynamics of fishlike swimming // *Annual Review of Fluid Mechanics*. — 2000. — Vol. 32, No. 1. — P. 33–53.
- Vetchanin E. V., Kilin A. A.* Free and controlled motion of a body with a moving internal mass through a fluid in the presence of circulation around the body // *Doklady Physics*. — 2016. — Vol. 61, No. 1. — P. 32–36.
- Vetchanin E. V., Valieva A. R.* Analysis of the force and torque arising during the oscillatory motion of a Joukowski foil in a fluid // *Rus. J. Nonlin. Dyn.* — 2023.
- Vorocheva (Volkova) L. Y., Jatsun S. F.* Control of the three-mass robot moving in the liquid environment // *Rus. J. Nonlin. Dyn.* — 2011. — Vol. 7, No. 4. — P. 845–857.
- Wang J., Tan X.* A dynamic model for tail-actuated robotic fish with drag coefficient adaptation // *Mechatronics*. — 2013. — Vol. 23, No. 6. — P. 659–668.
- Wang Y. W., Tan J. B., Gu B. T., Sang P. F., Zhao D. B.* Design and modeling of a biomimetic stingray-like robotic fish // *Advanced Materials Research*. — 2014. — Vol. 945–949. — P. 1473–1477.
- Zou T., Jian X., Al-Tamimi M., Wu X., Wu J.* Development of a low-cost soft robot fish with biomimetic swimming performance // *Journal of Mechanisms and Robotics*. — 2024. — Vol. 16, No. 6. — 14 p.

УДК: 532.5.013.4

Хаотизация течения под действием объемной силы

А. Н. Долуденко^а, Ю. М. Куликов^б, А. С. Савельев^с

Объединенный институт высоких температур Российской академии наук,
Россия, 125412, г. Москва, ул. Ижорская, д. 13, корп. 2

E-mail: ^а adoludenko@gmail.com, ^б kulikov-yurii@yandex.ru, ^с fisteh@mail.ru

Получено 10.10.2023, после доработки — 30.11.2023.

Принято к публикации 01.12.2023.

В предлагаемой статье приводятся результаты аналитического и компьютерного исследования хаотической эволюции регулярного поля скорости, возникающего под действием крупномасштабной гармонической вынуждающей силы. Авторами получено аналитическое решение для функции тока течения и ее производных величин (скорости, завихренности, кинетической энергии, энтропии и палинстрофии). Проведено численное моделирование эволюции течения с помощью пакета программ OpenFOAM (на основе модели несжимаемой среды), а также двух собственных реализаций, использующих приближение слабой сжимаемости (схемы КАБАРЕ и схемы МакКормака). Расчеты проводились на последовательности вложенных сеток с 64^2 , 128^2 , 256^2 , 512^2 , 1024^2 ячейками для двух характерных (асимптотических) чисел Рейнольдса Re_a , характеризующих ламинарную и турбулентную эволюцию течения соответственно. Моделирование показало, что разрушение аналитического решения происходит в обоих случаях. Энергетические характеристики течения обсуждаются на основе кривых энергии, а также скоростей диссипации. Для самой подробной сетки эта величина оказывается на несколько порядков меньше своего гидродинамического (вязкого) аналога. Разрушение регулярной структуры течения наблюдается для любого из численных методов, в том числе на поздних стадиях ламинарной эволюции, когда полученные распределения близки к аналитическим значениям. Можно предположить, что предпосылкой к развитию неустойчивости выступает ошибка, накапливаемая в процессе счета. Эта ошибка приводит к неравномерностям в распределении завихренности и, как следствие, к появлению вихрей различной интенсивности, взаимодействие которых приводит к хаотизации течения. Для исследования процессов производства завихренности мы использовали две интегральные величины, определяемые на ее основе, — интегральные энтропию (ζ) и палинстрофию (P). Постановка задачи с периодическими граничными условиями позволяет установить простую связь между этими величинами. Кроме того, ζ может выступать в качестве меры вихреразрешающей способности численного метода, а палинстрофия определяет степень производства мелкомасштабной завихренности.

Ключевые слова: турбулентность, завихренность, энтропия, палинстрофия, скорость диссипации, схема КАБАРЕ, схема МакКормака, пакет OpenFOAM

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 21-79-30062).

UDC: 532.5.013.4

Chaotic flow evolution arising in a body force field

A. N. Doludenko^a, Yu. M. Kulikov^b, A. S. Saveliev^c

Joint Institute for High Temperatures of Russian Academy of Sciences,
13/2 Izhorskaya st., Moscow, 125412, Russia

E-mail: ^a adoludenko@gmail.com, ^b kulikov-yurii@yandex.ru, ^c fisteh@mail.ru

Received 10.10.2023, after completion — 30.11.2023.

Accepted for publication 01.12.2023.

This article presents the results of an analytical and computer study of the chaotic evolution of a regular velocity field generated by a large-scale harmonic forcing. The authors obtained an analytical solution for the flow stream function and its derivative quantities (velocity, vorticity, kinetic energy, enstrophy and palinstrophy). Numerical modeling of the flow evolution was carried out using the OpenFOAM software package based on incompressible model, as well as two in-house implementations of CABARET and McCormack methods employing nearly incompressible formulation. Calculations were carried out on a sequence of nested meshes with 64^2 , 128^2 , 256^2 , 512^2 , 1024^2 cells for two characteristic (asymptotic) Reynolds numbers characterizing laminar and turbulent evolution of the flow, respectively. Simulations show that blow-up of the analytical solution takes place in both cases. The energy characteristics of the flow are discussed relying upon the energy curves as well as the dissipation rates. For the fine mesh, this quantity turns out to be several orders of magnitude less than its hydrodynamic (viscous) counterpart. Destruction of the regular flow structure is observed for any of the numerical methods, including at the late stages of laminar evolution, when numerically obtained distributions are close to analytics. It can be assumed that the prerequisite for the development of instability is the error accumulated during the calculation process. This error leads to unevenness in the distribution of vorticity and, as a consequence, to the variance vortex intensity and finally leads to chaotization of the flow. To study the processes of vorticity production, we used two integral vorticity-based quantities — integral enstrophy (ζ) and palinstrophy (P). The formulation of the problem with periodic boundary conditions allows us to establish a simple connection between these quantities. In addition, ζ can act as a measure of the eddy resolution of the numerical method, and palinstrophy determines the degree of production of small-scale vorticity.

Keywords: turbulence, vorticity, enstrophy, palinstrophy, dissipation rate, CABARET scheme, McCormack scheme, OpenFOAM

Citation: *Computer Research and Modeling*, 2024, vol. 16, no. 4, pp. 883–912 (Russian).

The study was supported by a grant from the Russian Science Foundation (project No. 21-79-30062).

Введение

Турбулентное движение является настолько широко распространенным в природе и инженерных приложениях, что это состояние, по сути, можно считать нормальным для течений жидкости и газа. Отсутствие до настоящего времени общепринятого определения турбулентности свидетельствует о ее сложности и многообразности. Однако ее можно охарактеризовать совокупностью признаков. Турбулентное течение далеко от равновесия и сильно хаотично, в нем происходят интенсивные вращательные движения, что обуславливает эффективность смешения жидких частиц, перенос массы, энергии и импульса. Одной из ключевых особенностей турбулентности является то, что ее эволюция может быть представлена в виде совокупности движений вихрей различной формы, которые охватывают широкий диапазон пространственных и временных масштабов. Размер таких структур варьируется от гигантских атмосферных вихрей (циклонов или антициклонов), простирающихся на сотни километров, до крошечных вихрей диаметром порядка нескольких миллиметров. Ширина этого диапазона связана с числом Рейнольдса Re , которое представляет собой отношение инерционных сил к вязким. При больших числах Рейнольдса силы инерции преобладают над силами трения в течении на несколько порядков, что приводит к появлению вихрей различных масштабов и турбулизации течения. Однако существование вязкости является одним из необходимых условий поддержания турбулентности [McDonough, 2014].

Отметим, что вихри могут существовать и в ламинарном движении, при этом их поведение является более или менее независимым, что допускает относительно простое описание такого течения. Нелинейности в уравнениях Навье–Стокса, которые определяют характер течения жидкости, подразумевают сильные связи между масштабами, такие, что вихри разных размеров постоянно обмениваются между собой энергией и импульсом. Как следствие, без понимания динамики на мелких масштабах невозможно предсказать крупномасштабную динамику всего потока (поля средней скорости), и наоборот.

Одной из ключевых идей теории турбулентности является представление о существовании каскада энергии от больших вихрей к малым, которое было предложено Л. Ричардсоном [Richardson, Lynch, 2007]: большие вихри порождают вихри меньшего размера, которые в свою очередь распадаются на меньшие до тех масштабов, на которых основную роль начинает играть вязкость, преобразовывающая турбулентную кинетическую энергию в тепло. Эта идея доминирует в современном понимании турбулентности, она нашла свое отражение в разработанной А. Н. Колмогоровым теории изотропной турбулентности [Колмогоров, 1941a; Колмогоров, 1941b].

Двумерная турбулентность представляет собой специфическую разновидность хаотических движений жидкости, поэтому вполне естественным шагом стало обобщение идей Колмогорова на случай плоских турбулентных течений, что отражено в ряде фундаментальных работ Крейчнана [Kraichnan, 1967], Лейта [Leith, 1968] и Бэтчелора [Batchelor, 1969]. Однако двумерная турбулентность представляет не только теоретический интерес, ее свойства могут проявляться в природных явлениях и специально поставленных лабораторных экспериментах. Свойства двумерной турбулентности наблюдаются в атмосферном слое Земли, толщина которого намного меньше его поперечной протяженности [Charney, 1971; Rhines, 1979; Bouchet, Venaille, 2012; Gage, 1979; Gage, Nastrom, 1986; Lilly, 1989; Tulloch, Smith, 2006], в крупномасштабных зональных течениях в океанах или в атмосфере планет Солнечной системы [Read, 2001; Galperin et al., 2004; Read, 2001; Galperin et al., 2004; Scott, Arbic, 2007; Scott, Polvani, 2007], а также в задачах астрофизики (например, аккреционные диски) [Balbus, Hawley, 1998; Mukhopadhyay, Afshordi, Narayan, 2005; Brandenburg, Nordlund, 2011].

Моделирование двумерной турбулентности является более доступным с точки зрения требуемых компьютерных ресурсов по сравнению со своим трехмерным аналогом. Достижения

в области компьютерной техники и численных методов позволяют проводить прямое численное моделирование (DNS) с постоянно возрастающим разрешением и продолжительностью таких течений [Lilly, 1969; Lilly, 1972; Siggia, Aref, 1981; Basdevant et al., 1981; Hossain, Matthaeus, Montgomery, 1983; Frisch, Sulem, 1984; Smith, Yakhot, 1993; Smith, Yakhot, 1994; Farge, Schneider, Kevlahan, 1999; Tran, Bowman, 2004; Chertkov et al., 2007; Boffetta, 2007; Perlekar, Pandit, 2009; Boffetta, Musacchio, 2010].

Важным достоинством двумерной турбулентности является относительно простая реализация в лабораторных экспериментах, в частности в течениях мыльных пленок и слоях электролитов. Особо примечательной является работа [Sommeria, 1986], в которой было получено несколько важных результатов. Во-первых, была четко определена неустойчивость квадратной периодической решетки вихрей из-за их слияния. Этот результат является демонстрацией того, что двумерная турбулентность может создаваться гидродинамической неустойчивостью без каких-либо случайных воздействий. Во-вторых, впервые получено экспериментальное измерение обратного энергетического каскада. В-третьих, было экспериментально установлено, что в случае малого трения происходит конденсация энергии в крупномасштабных гармониках, которая может быть описана с помощью статистической термодинамики. Авторы [Couder, Chomaz, Rabaud, 1989] впервые показали, что пленку можно рассматривать как двумерную жидкость с локальной плотностью, пропорциональной ее толщине. Пленка ведет себя как несжимаемая жидкость, если движения происходят со скоростями, меньшими по сравнению со скоростью распространения упругих волн. В работе [Gharib, Derango, 1989] представлен новый экспериментальный подход к созданию двумерных потоков. В данном методе мыльная пленка приводится в движение в длинной рамке с использованием плоской струи воды в качестве тянущего механизма. Данный подход позволил создавать различные сдвиговые потоки для количественных исследований с помощью лазерного доплеровского измерителя скорости: обтекание круглого цилиндра с малым числом Рейнольдса ($Re = 38$), след за круговым цилиндром ($Re = 110$), течение в плоской каверне, обтекание обратного уступа, турбулентность за решеткой.

В работе [Paret et al., 1997] впервые экспериментально показано существование стационарного двумерного обратного энергетического каскада в слое электролита. Авторы [Paret, Tabeling, 1997] обсуждают релаксацию трехмерных возмущений в потоках, генерируемых в тонких стратифицированных по плотности слоях короткими импульсами тока длительностью 1–2 с. Время релаксации таких возмущений оказывается мало по сравнению с другими характерными временами системы. Эти результаты дают основу для оценки двумерности свободно затухающей турбулентности, наблюдаемой в опытах. В экспериментах [Rutgers, 1998] проводилось комбинированное экспериментальное исследование вынужденной и затухающей двумерной турбулентности, которая возбуждалась за решеткой цилиндров в текущих мыльных пленках. В работе [Rivera, Vorobieff, Ecke, 1998] впервые было экспериментально получено значение числа Рейнольдса, основанное на тейлоровском микромасштабе $Re_\lambda \approx 100$. Показано, что эффекты сжимаемости, возникающие из-за изменений толщины пленки, не оказывают влияния на корреляции скорости, завихренности и потока энтропии, которые согласуются с теоретическими предсказаниями для двумерной турбулентности.

Обширное экспериментальное исследование [Paret, Tabeling, 1998] двумерного обратного энергетического каскада, возникающего в тонких устойчиво стратифицированных слоях жидкости под воздействием электромагнитного поля, показало существование двух различных режимов, реализация которых зависит от трения: когда трение мало, закачиваемая энергия накапливается в самом крупном масштабе, создавая среднее вращение. Данное явление также получило название спектральной конденсации. При больших значениях трения наблюдается обратный каскад энергии, который оказывается стационарным, однородным и изотропным. В работе [Paret, Jullien, Tabeling, 1999] впервые проведены детальные экспериментальные наблюдения двумер-

ного каскада энтропии, а также собрана статистика завихренности высокого порядка, показано, что в энтропийном каскаде не наблюдается сколько-нибудь мелкомасштабной перемежаемости. В экспериментах [Rivera, Wu, 2000] турбулентность в свободно подвешенной мыльной пленке создается электромагнитным воздействием и измеряется путем отслеживания движения частиц.

В работе [Rivera, Wu, Yeung, 2001] исследованы статистические свойства локальной топологии двумерной турбулентности на мыльной пленке, вызванной электромагнитным воздействием. Эксперименты [Rivera, Wu, 2002] показали, что существование инерционного каскада в одномерной турбулентности возможно только при соблюдении ряда соотношений между различными масштабами: внешним масштабом (r_{out}), размером экспериментальной установки (r_{sys}), масштабом действия объемной силы (r_{inj}), а также интегральным масштабом (r_{int}). В работе [Rivera et al., 2003] представлены экспериментальные данные о прямом каскаде энтропии в затухающей двумерной турбулентности. Экспериментальные измерения проводились в проточном канале из мыльной пленки, квазидвумерной системе, для которой можно легко генерировать затухающую турбулентность с низким или умеренным числом Рейнольдса ($10^2 \leq Re \leq 10^4$).

Авторы [Xia, Shats, Falkovich, 2009] экспериментально изучали свойства ограниченной турбулентности в тонких слоях жидкости. В такой постановке особенно важными оказываются эффекты придонного трения и спектральной конденсации энергии. Обратный каскад энергии в ограниченном турбулентном квазидвумерном потоке приводит к образованию большого когерентного вихревого конденсата, подпитываемого турбулентностью. Этот вихрь, в зависимости от своей силы, может существенно влиять на статистику турбулентности даже на небольших масштабах.

Волны Фарадея могут использоваться для генерации каскада двумерной турбулентности [Francois et al., 2013]. Хотя движение частиц в волнах Фарадея является трехмерным, колебания скорости в горизонтальном направлении обнаруживают неожиданное сходство с двумерной турбулентностью. Обратный каскад обнаружен путем измерения частотных спектров лагранжевой скорости и подтвержден расчетом третьего момента горизонтальных колебаний скорости.

Постановка задачи, описываемой в данной статье, мотивирована экспериментами, изложенными в [Orlov, Brazhnikova, Levchenko, 2018], где изучалась двумерная турбулентность в тонком слое электролита, возбуждаемая системой цилиндрических магнитов (10×10), расположенных в шахматном порядке. При пропускании постоянного тока через электролит жидкость начала двигаться под действием силы Лоренца. В результате этого воздействия возникала система вихрей 8×10 , эволюция которых воспроизводила основные особенности двумерной турбулентности (обратный каскад энергии, спектральная конденсация, образование когерентного вихря).

В предлагаемом исследовании сила Лоренца заменяется на объемную гармоническую силу общего вида, действие которой приводит к хаотизации двумерного течения. В последующих разделах описываются постановка задачи и ее аналитическое решение, обсуждаются основные уравнения переноса вихревых характеристик течения, приводятся сведения об использованных численных методах. Результаты моделирования представлены в виде совокупности интегральных параметров, процесс хаотизации обсуждается на основе поведения энергетических характеристик течения (кинетической энергии, скоростей диссипации) и интегралов завихренности.

Постановка задачи и аналитическое решение

Рассмотрим течение вязкой несжимаемой жидкости под действием вынуждающей силы, которое возникает в прямоугольной расчетной области размером $L_X \times L_Y = L^2 = 2\pi \times 2\pi$ и опи-

сывается системой уравнений законов сохранения массы и количества движения:

$$\begin{aligned}\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{V}) &= 0, \\ \frac{\partial \rho u}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u \vec{V}) &= -\frac{\partial p}{\partial x} + \rho G \cos(ky) + \mu \Delta u, \\ \frac{\partial \rho v}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho v \vec{V}) &= -\frac{\partial p}{\partial y} - \rho G \cos(kx) + \mu \Delta v, \\ \vec{V} &= (u, v)^T.\end{aligned}\quad (1)$$

В качестве начальных условий для поля скорости задается неподвижная среда

$$u(t=0) = 0, \quad v(t=0) = 0, \quad (2)$$

а на границах устанавливается условие периодичности. В частности, для скорости в направлении X

$$u(x=0) = u(x=2\pi), \quad u(y=0) = u(y=2\pi). \quad (3)$$

Аналогичные условия задаются для скорости v и давления p .

Для поиска аналитического решения введем функцию тока $\psi(x, y)$ течения, определяющую поле скорости $\vec{V} = (u, v)^T$:

$$u = \frac{\partial \psi}{\partial y}, \quad v = -\frac{\partial \psi}{\partial x}, \quad (4)$$

эта подстановка автоматически удовлетворяет уравнению неразрывности и позволяет использовать формулировку «завихренность – функция тока»:

$$\begin{aligned}\Delta \psi &= -\omega, \\ \frac{\partial \omega}{\partial t} + \frac{\partial \psi}{\partial y} \frac{\partial \omega}{\partial x} - \frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial \omega}{\partial y} &= \nu \Delta \omega + kG(\sin(kx) + \sin(ky)),\end{aligned}\quad (5)$$

где введены кинематическая вязкость $\nu = \frac{\mu}{\rho}$ и завихренность,

$$\omega = \nabla \times \vec{V}. \quad (6)$$

Вынуждающая сила действует в каждом из ортогональных направлений, таким образом, следует искать решение для функции тока в виде суперпозиции двух гармонических рядов (2π -периодических функций):

$$\psi = \sum_{m=0}^{\infty} a_m(t) \sin(mx) + \sum_{l=0}^{\infty} b_l(t) \sin(ly), \quad (7)$$

тогда завихренность будет иметь вид

$$\omega = \sum_{m=0}^{\infty} m^2 a_m(t) \sin(mx) + \sum_{l=0}^{\infty} l^2 b_l(t) \sin(ly). \quad (8)$$

Если мы подставим частное решение (7), (8) в уравнение завихренности из (5), а затем раскроем произведения рядов, то мы получим слагаемые, содержащие следующие комбинации тригонометрических функций:

$$\sin(mx), \quad \sin(ly), \quad \cos(mx) \cos(ly). \quad (9)$$

Домножая получившееся уравнение на $\sin(px)$ и интегрируя по dx на отрезке $x \in [0, 2\pi]$, получим следующие значения интегралов от (9):

$$\begin{aligned} \int_0^{2\pi} \sin(px) \sin(mx) dx &= \begin{cases} 0, & p \neq m, \\ \pi, & p = m, \end{cases} \\ \int_0^{2\pi} \sin(px) \sin(ly) dx &= 0, \\ \int_0^{2\pi} \sin(px) \cos(ly) \cos(mx) dx &= 0, \\ \int_0^{2\pi} \sin(px) \sin(kx) &= \begin{cases} 0, & p \neq k, \\ \pi, & p = k, \end{cases} \\ \int_0^{2\pi} \sin(px) \sin(ky) dx &= 0. \end{aligned} \quad (10)$$

Аналогичные результаты получаются и при домножении на $\sin(py)$.

Рассмотрим случай $p \neq k$, тогда решение обыкновенного дифференциального уравнения для коэффициентов с учетом начальных условий дает $a_p = 0$ ($b_p = 0$). Если же номер гармоники в ряду совпадает с возмущением ($p = m$, $p = k$), то

$$k^2 \dot{a}_k(t) = -\nu k^4 a_k(t) + kG, \quad (11)$$

что дает

$$a_k(t) = \frac{G}{\nu k^3} (1 - e^{-\nu k^2 t}). \quad (12)$$

Аналогично для $b(t)$:

$$b_k(t) = \frac{G}{\nu k^3} (1 - e^{-\nu k^2 t}). \quad (13)$$

Тогда частное решение для функции тока будет иметь вид

$$\psi(t) = \frac{G}{\nu k^3} (1 - e^{-\nu k^2 t}) (\sin(kx) + \sin(ky)). \quad (14)$$

Соответствующее поле скорости:

$$\begin{aligned} u &= \frac{\partial \psi}{\partial y} = \frac{G}{\nu k^2} (1 - e^{-\nu k^2 t}) \cos(ky), \\ v &= -\frac{\partial \psi}{\partial x} = -\frac{G}{\nu k^2} (1 - e^{-\nu k^2 t}) \cos(kx); \end{aligned} \quad (15)$$

поле завихренности:

$$\omega(t) = \frac{G}{\nu k} (1 - e^{-\nu k^2 t}) (\sin(kx) + \sin(ky)). \quad (16)$$

Получим выражение для аналитического распределения давления. Для этого применим операцию дивергенции к уравнениям Навье – Стокса, что дает уравнение для давления:

$$\Delta p = -\left(\frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial u}{\partial x} + 2 \frac{\partial v}{\partial x} \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial y} \frac{\partial v}{\partial y} \right). \quad (17)$$

Подстановка частного решения для компонент скорости (15) в уравнение (17) приводит уравнение для давления к виду

$$\Delta p = -\frac{2G^2}{\nu k^2} (1 - e^{-\nu k^2 t})^2 \sin(kx) \sin(ky). \quad (18)$$

Будем искать частное решение для давления в виде

$$p = A \sin(ky) \sin(kx), \quad (19)$$

подстановка которого в уравнение (18) позволяет определить конечный вид решения:

$$p = -\frac{G^2}{\nu^2 k^4} (1 - e^{-\nu k^2 t})^2 \sin(kx) \sin(ky). \quad (20)$$

Введем значение характерной скорости:

$$U_a = \frac{G}{\nu k^2},$$

определим асимптотическое число Рейнольдса Re_a по характерному размеру расчетной области $L = 2\pi$:

$$Re_a = \frac{2\pi U_a \rho}{\mu} = \frac{2\pi G \rho^2}{\mu^2 k^2}.$$

Также можно ввести характерное время развития основного (невозмущенного) течения:

$$T_a = \frac{1}{\nu k^2} = \frac{\rho}{\mu k^2}.$$

Здесь следует обратить внимание на квадратичную зависимость этой величины от номера гармоники возмущающей силы k ; таким образом, задание высокочастотных пространственных гармоник позволяет существенно сократить время «накачки». При $t \rightarrow \infty$ поле скорости достигает своих асимптотических значений:

$$u = U_a \cos(ky), \quad v = U_a \cos(kx). \quad (21)$$

Для проверки результатов аналитической теории авторами выполнено моделирование эволюции течения на основе трех подходов: пакета программ OpenFOAM с использованием модели несжимаемой среды, а также собственных реализаций метода МакКормака и метода КАБАРЕ на основе приближения слабой сжимаемости. Для исследования сеточной сходимости расчеты выполнялись на последовательности равномерных расчетных сеток с 64^2 , 128^2 , 256^2 , 512^2 , 1024^2 ячейками.

Пространственная частота вынуждающей силы составляет $k = 9$, характерная плотность жидкости — $\rho_0 = 1000$. Исходя из особенностей аналитического решения, нами было выбрано два режима, наиболее подходящих для моделирования: (1) $G = 0,48$, $\nu = 6 \cdot 10^{-3}$, $U_a = 0,987$, $T_a = 2,057$, $Re_a = 1034$; (2) $G = 0,05$, $\nu = 10^{-4}$, $U_a = 6,17$, $T_a = 123,45$, $Re_a = 387\,850$. Первый режим соответствует ламинарной эволюции течения, второй приводит к развитию двумерной турбулентности.

Уравнения переноса характеристик турбулентности в вихревом течении

Переход к двумерной турбулентности сохраняет представление об энергетическом каскаде: энергия вводится в одном масштабе и рассеивается в другом, при этом передача между масштабами происходит практически без потерь. Наиболее яркой отличительной чертой двумерной турбулентности является то, что в возбуждаемой (forced), статистически стационарной, однородной изотропной турбулентности наблюдается обратный каскад энергии от малых масштабов к большим, что приводит к образованию крупных вихрей (в отсутствие трения), размер которых сопоставим с размером системы. Причина появления обратного каскада кроется в специфической эволюции завихренности, которая выступает в качестве меры вращательного движения жидкости. Квадрат завихренности, называемый энстрофией, измеряет локальную интенсивность вращения. В трехмерном течении полная энстрофия в потоке (то есть объемный интеграл энстрофии) может меняться двумя способами. Как и энергия, она может рассеиваться за счет вязких эффектов. Но даже при отсутствии вязкости энстрофия может измениться посредством процесса, называемого растяжением вихря. Если вихрь сильно растянут, то скорость его вращения и, следовательно, энстрофия возрастают. Однако при плоском движении растяжение вихря произойти не может, в этом случае нет оси, перпендикулярной вихрю, в направлении которой могло бы происходить растяжение. В результате полная энстрофия, как и энергия, сохраняется в двумерных потоках без вязкости.

Аргументы в пользу каскада энергии в трехмерной турбулентности в равной степени применимы и к энстрофии в двумерном случае. Из результатов теории для трехмерной турбулентности можно заключить, что скорость диссипации энергии определяется произведением вязкости и энстрофии. В то же время диссипация энергии не зависит от вязкости даже в пределе малых значений, ее уменьшение будет уравниваться увеличением энстрофии из-за усиления растяжения вихрей. При совершении предельного перехода к идеальной жидкости скорость диссипации будет стремиться к нулю наряду с вязкостью, так как в двумерном течении механизм растяжения вихрей оказывается заблокированным. Таким образом, в развитой двумерной турбулентности при больших числах Рейнольдса вязкость почти не рассеивает энергию, однако, если эта энергия передается мелким вихрям в каскадном процессе, она будет поглощена вязкой диссипацией.

Формирование обратного каскада сильно отличает двумерную турбулентность от ее более распространенного трехмерного аналога. Обычный трехмерный турбулентный поток очень хаотичен, а физические величины, описывающие движение, демонстрируют частые и сильные колебания. Перекачка энергии осуществляется в небольшие вихри, что приводит к большим градиентам поля скорости. Напротив, в двумерной турбулентности каскад направляет энергию в пространственно гладкие большие вихри, тем самым улучшая пространственную когерентность за счет сглаживания мелкомасштабных неоднородностей. Таким образом, в то время как турбулентные потоки в трехмерном пространстве в основном некогерентны, в двумерной геометрии они имеют сильную тенденцию к самоорганизации и формированию долгоживущих крупномасштабных структур.

Как уже упоминалось во введении, хаотичное движение сплошной среды можно представить в виде множества вихрей, активно взаимодействующих между собой. Наиболее простой способ количественного описания этого множества связан с введением завихренности (6). Применение операции $\nabla \times$ к уравнениям Навье – Стокса позволяет получить уравнение для завихренности:

$$\frac{D\vec{\omega}}{Dt} = (\vec{\omega} \cdot \nabla)\vec{V} + \nu \nabla^2 \vec{\omega}. \quad (22)$$

Домножая уравнение (22) скалярно на $\vec{\omega}$, можно получить уравнение переноса энтрофии $\frac{\vec{\omega}^2}{2}$:

$$\frac{D}{Dt} \left(\frac{\vec{\omega}^2}{2} \right) = \omega_i \omega_j S_{ij} - \nu (\nabla \times \omega) + \nu \nabla \cdot [\vec{\omega} \times (\nabla \times \vec{\omega})], \quad (23)$$

$\frac{D}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla$ — субстанциональная производная, S_{ij} — компонент тензора скоростей деформации. В двумерном случае вектор завихренности $\vec{\omega}$ имеет лишь одну отличную от нуля (вертикальную) компоненту ω и оказывается перпендикулярным плоскости движения; таким образом, уравнения (22), (23) преобразуются к виду

$$\frac{D\omega}{Dt} = \nu \nabla^2 \omega, \quad (24)$$

$$\frac{D}{Dt} \left[\frac{\omega^2}{2} \right] = -\nu [(\nabla \omega)^2 - \nabla \cdot (\omega \nabla \omega)]. \quad (25)$$

Первое слагаемое справа в уравнении (25) представляет собой еще одну величину, характеризующую скорость производства энтрофии (завихренности), называемую палинстрофией, которая в двумерных движениях определяется как $\frac{(\nabla \omega)^2}{2}$.

Уравнение переноса палинстрофии может быть получено из уравнения (22) для трехмерного случая путем применения операции $\nabla \times$ и домножением на $\nabla \times \vec{\omega}$. Полученное уравнение для трехмерной палинстрофии затем редуцируется к плоскому случаю:

$$\frac{D}{Dt} \left[\frac{1}{2} (\nabla \omega)^2 \right] = -S_{ij} (\nabla \omega)_i (\nabla \omega)_j - \nu \left[(\nabla^2 \omega)^2 - \nabla \cdot ((\nabla^2 \omega) \nabla \omega) \right], \quad (26)$$

где $S_{ij} (\nabla \omega)_i (\nabla \omega)_j$ — свертка тензора скоростей деформации $\overset{\leftrightarrow}{S}$ с тензорной диадой $(\nabla \omega)_i (\nabla \omega)_j$.

При эволюции свободной турбулентности в бесконечной периодически продолженной области интегралы кинетической энергии

$$E = \iint \frac{\rho(u^2 + v^2)}{2} dx dy, \quad (27)$$

энтрофии

$$\zeta = \iint \frac{\omega^2}{2} dx dy \quad (28)$$

и палинстрофии

$$\widehat{P} = \iint \frac{(\nabla \omega)^2}{2} dx dy, \quad (29)$$

позволяющие судить об эволюции завихренности и качестве воспроизведения численным методом вихревых образований, оказываются связанными простыми соотношениями

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} E &= -\nu \zeta, \\ \frac{d}{dt} \zeta &= -\nu \widehat{P}. \end{aligned} \quad (30)$$

В дальнейшем при обсуждении результатов мы будем рассматривать различные слагаемые диссипации кинетической энергии, в том числе обусловленные вязкой диссипацией и использованием приближения слабой сжимаемости.

Численные методы

Описание численного метода КАБАРЕ, использующего приближение слабой сжимаемости

Для численного моделирования течений несжимаемой жидкости можно использовать явные разностные схемы, предназначенные для моделей сжимаемой жидкости. В этом случае уравнение состояния для газа заменяется на более простое, зависящее только от плотности жидкости. В этом разделе мы опишем основные особенности схемы КАБАРЕ [Головизнин, Самарский, 1998а; Головизнин, Самарский, 1998b] для двумерного течения слабосжимаемой вязкой жидкости. Запишем однородные дифференциальные уравнения (ДУ) в частных производных (ЧП), которые описывают сохранение массы и импульса в консервативной форме для идеальной жидкости:

$$\begin{aligned}\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u}{\partial x} + \frac{\partial \rho v}{\partial y} &= 0, \\ \frac{\partial \rho u}{\partial t} + \frac{\partial \rho u^2}{\partial x} + \frac{\partial \rho uv}{\partial y} + \frac{\partial p}{\partial x} &= \rho G \cos(ky), \\ \frac{\partial \rho v}{\partial t} + \frac{\partial \rho uv}{\partial x} + \frac{\partial \rho v^2}{\partial y} + \frac{\partial p}{\partial y} &= -\rho G \cos(ky), \\ p &= c^2(\rho - \rho_0),\end{aligned}\tag{31}$$

где ρ, ρ_0 — переменная и характерная плотности сплошной среды; u, v — компоненты скорости; p — давление; c — скорость звука; t — время; x, y — пространственные координаты.

Перепишем (31) в виде гиперболической системы уравнений относительно вектора-столбца примитивных переменных $\vec{q}^T = (\rho, u, v)$:

$$\frac{\partial \vec{q}}{\partial t} + A_x \cdot \frac{\partial \vec{q}}{\partial x} + A_y \cdot \frac{\partial \vec{q}}{\partial y} = 0.\tag{32}$$

Эти однородные ДУ в ЧП можно рассматривать как неоднородную систему уравнений переноса вдоль направления X :

$$\frac{\partial \vec{q}}{\partial t} + A_x \cdot \frac{\partial \vec{q}}{\partial x} = F_x, \quad F_x = -A_y \cdot \frac{\partial \vec{q}}{\partial y},\tag{33}$$

а также вдоль направления Y :

$$\frac{\partial \vec{q}}{\partial t} + A_y \cdot \frac{\partial \vec{q}}{\partial y} = F_y, \quad F_y = -A_x \cdot \frac{\partial \vec{q}}{\partial x},\tag{34}$$

где введены матрицы

$$A_x = \begin{pmatrix} u & c^2 \rho & 0 \\ \frac{1}{\rho} & u & 0 \\ 0 & 0 & u \end{pmatrix}, \quad A_y = \begin{pmatrix} v & 0 & c^2 \rho \\ 0 & v & 0 \\ \frac{1}{\rho} & 0 & v \end{pmatrix}.\tag{35}$$

Для матрицы A_x можно получить следующие собственные значения и собственные векторы:

$$\lambda_1^x = u + c, \quad \lambda_2^x = u + c, \quad \lambda_3^x = u,\tag{36}$$

$$\omega_1^x = \begin{pmatrix} \frac{1}{\rho c} \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \omega_2^x = \begin{pmatrix} -\frac{1}{\rho c} \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \omega_3^x = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix};\tag{37}$$

аналогично для A_y :

$$\lambda_1^y = v + c, \quad \lambda_2^y = v + c, \quad \lambda_3^y = v, \quad (38)$$

$$\omega_1^y = \begin{pmatrix} \frac{1}{\rho c} \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \omega_2^y = \begin{pmatrix} -\frac{1}{\rho c} \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \omega_3^y = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (39)$$

На основе собственных векторов строятся матрицы

$$\Omega_x = \begin{pmatrix} (\omega_1^x)^T \\ (\omega_2^x)^T \\ (\omega_3^x)^T \end{pmatrix}, \quad \Omega_y = \begin{pmatrix} (\omega_1^y)^T \\ (\omega_2^y)^T \\ (\omega_3^y)^T \end{pmatrix},$$

а также диагональные матрицы Λ_x, Λ_y , составленные из собственных значений, на которые затем попарно умножаются уравнения (33), (34):

$$\Omega_x \cdot \frac{\partial \vec{q}}{\partial t} + \Lambda_x \cdot \Omega_x \frac{\partial \vec{q}}{\partial x} = \vec{G}_x, \quad \vec{G}_x = \Omega_x \cdot F_x, \quad (40)$$

$$\Omega_y \cdot \frac{\partial \vec{q}}{\partial t} + \Lambda_y \cdot \Omega_y \frac{\partial \vec{q}}{\partial y} = \vec{G}_y, \quad \vec{G}_y = \Omega_y \cdot F_y, \quad (41)$$

что дает систему уравнений для переноса для инвариантов Римана:

$$\frac{\partial I_k^x}{\partial t} + \lambda_k^x \frac{\partial I_k^x}{\partial x} = G_k^x, \quad \frac{\partial I_k^y}{\partial t} + \lambda_k^y \frac{\partial I_k^y}{\partial y} = G_k^y, \quad k = 1, 2, 3, \quad (42)$$

где

$$\begin{aligned} I_1^x &= c \ln(p + c^2 \rho_0) + u, & I_2^x &= -c \ln(p + c^2 \rho_0) + u, & I_3^x &= v, \\ I_1^y &= c \ln(p + c^2 \rho_0) + v, & I_2^y &= -c \ln(p + c^2 \rho_0) + v, & I_3^y &= u. \end{aligned} \quad (43)$$

В большинстве случаев для жидкостей справедливо $p \ll c^2 \rho_0$, что позволяет привести акустические инварианты Римана I_1^x и I_2^x к более простому виду, используя разложение в ряд Тейлора $\left(I_1^x = u + \frac{p}{c \rho_0}\right)$. Однако к этому преобразованию следует относиться с осторожностью, так как для произвольного набора исходных данных требование $p \ll c^2 \rho_0$ может не выполняться, а также теряются ограничения на область определения логарифмической функции. Таким образом, сохранение логарифма представляет собой неявную проверку согласования начальных и граничных условий.

Запишем неоднородные уравнения количества движения вязкого течения:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho u}{\partial t} + \frac{\partial \rho u^2}{\partial x} + \frac{\partial \rho u v}{\partial y} + \frac{\partial p}{\partial x} &= F_u^{\text{visc}} + G \rho \cos(ky), \\ \frac{\partial \rho v}{\partial t} + \frac{\partial \rho u v}{\partial x} + \frac{\partial \rho v^2}{\partial y} + \frac{\partial p}{\partial y} &= F_v^{\text{visc}} - G \rho \cos(kx), \end{aligned} \quad (44)$$

а также, используя обозначения

$$f_x^u = \frac{\partial u}{\partial x}, \quad f_y^u = \frac{\partial u}{\partial y}, \quad f_x^v = \frac{\partial v}{\partial x}, \quad f_y^v = \frac{\partial v}{\partial y}, \quad (45)$$

выражение для тензора вязких напряжений $\sigma = \frac{\mu}{2} [\nabla v + (\nabla v)^T]$:

$$\sigma = \frac{\mu}{2} \begin{pmatrix} 0 & f_y^u + f_x^v \\ f_y^u + f_x^v & 0 \end{pmatrix}. \quad (46)$$

На этом этапе мы пренебрегаем влиянием сжимаемости и записываем выражения для правых частей неоднородных уравнений переноса в дивергентной форме:

$$\begin{aligned} F_u^{\text{visc}} &= \mu \left(\frac{\partial f_x^u}{\partial x} + \frac{\partial f_y^u}{\partial y} \right), \\ F_v^{\text{visc}} &= \mu \left(\frac{\partial f_x^v}{\partial x} + \frac{\partial f_y^v}{\partial y} \right). \end{aligned} \quad (47)$$

В схеме КАБАРЕ используются две системы уравнений в консервативной и характеристической формах. Переменные этих систем определены в разных точках расчетной области. Переменные консервативной формы (P, U, V) связаны с центрами ячеек, а переменные характеристической формы (ρ, u, v) локализованы в центрах граней и в дальнейшем будут называться потоковыми переменными.

Таким образом, для двумерного случая необходимо ввести множества узлов расчетной сетки для консервативных ($\mathbb{M}_C = \{i + \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2}\}$) и потоковых ($\mathbb{M}_X = \{i, j + \frac{1}{2}\}$ (в направлении X), $\mathbb{M}_Y = \{i + \frac{1}{2}, j\}$ (в направлении Y)) переменных. Здесь и далее индекс $i = 1, \dots, n_X$ нумерует точки в продольном направлении (X), $j = 1, \dots, n_Y$ — в поперечном направлении (Y), n обозначает номер временного шага, а $n + \frac{1}{2}$ относится только к консервативным переменным на промежуточном слое.

Более детально особенности текущей реализации схемы КАБАРЕ, а также ее применение к задаче об эволюции двойного сдвигового слоя описаны в работах [Kulikov, Son, 2016; Kulikov, Son, 2017].

Описание настроек пакета программ OpenFOAM

В пакете OpenFOAM уравнения неразрывности и Навье–Стокса решаются методом конечных объемов (FVM, Finite Volume Method) [Nilsson, 2013]. Расчетная область разбивается на одинаковые ячейки квадратной формы. Для решения применяется стандартный солвер pisoFoam, использующий итерационный алгоритм нахождения поля давления методом PISO (Pressure Implicit with Splitting of Operators). Данный солвер предназначен для моделирования нестационарных турбулентных несжимаемых течений жидкостей, в том числе неньютоновских. Этот солвер дает возможность дополнить уравнение импульса объемной силой. Для линейаризации решаемых уравнений применяются следующие схемы дискретизации (по времени и пространству) [Guertero, 2020]: по времени — неявная первого порядка точности, для вычисления градиента, дивергенции, лапласиана — второго порядка точности. Для решения системы линейаризованных дифференциальных уравнений применяется решатель GAMG (Generalized Geometric-Algebraic MultiGrid [Moukalled, Mangani, Darwish, 2016]), для которого установлены следующие условия окончания итераций: невязка менее 10^{-6} или относительная невязка 0,05 (0 для грубых сеток).

Замечание об использовании схемы МакКормака в приближении слабой сжимаемости

Численное решение уравнений Навье–Стокса основано на методе искусственной сжимаемости [Anderson, Tannehill, Pletcher, 2016]. При этом гиперболическая часть уравнений решается явным методом МакКормака [MacCormack, 2001], а параболическая часть — стандартным методом конечных разностей. Схема МакКормака имеет второй порядок точности по пространству и времени. Каждый этап расчета на каждом временном слое разделен на 4 шага: разности вперед и разности назад у предиктора вдоль направления X , а также разности вперед и назад у предиктора по направлению Y . На этапе корректора аналогично, за исключением того, что шаг «вперед»

меняется на «назад» и наоборот. Эти шаги циклически сменяют друг друга с каждым временным слоем. Метод МакКормака хорошо зарекомендовал себя при решении гиперболических уравнений газо- и гидродинамики. Для замыкания системы уравнений используется уравнение состояния вида

$$dp = c^2 \rho_0 \frac{d\rho}{\rho}, \quad (48)$$

где c — скорость звука (скорость распространения возмущений), определяемая как

$$c = \sqrt{\frac{1}{\rho\beta}}, \quad (49)$$

ρ — плотность жидкости, β — коэффициент сжимаемости. При использовании метода искусственной сжимаемости степень сжимаемости β может варьироваться, что непосредственно влияет на скорость распространения возмущений. Эта скорость должна быть больше возможных максимальных скоростей течения, возникающих при моделировании.

Обсуждение результатов

Кинетическая энергия

Кинетическая энергия определяется как величина, нормированная на площадь расчетной области. Определим аналитическое значение интеграла (27) для конечных чисел Рейнольдса:

$$\widehat{E} = 2\pi^2 U^2 (1 - e^{-\nu k^2 t}), \quad (50)$$

обезразмерим полученный интеграл на площадь расчетной области:

$$E = \frac{U_a^2}{2} (1 - e^{-\nu k^2 t})^2 = \frac{1}{2} \frac{G^2}{\nu^2 k^4} (1 - e^{-\nu k^2 t})^2. \quad (51)$$

При расчете по схеме КАБАРЕ поведение кривых кинетической энергии носит регулярный характер как в случае большой, так и малой вязкости. При малых Re_a на грубых сетках аналитические значения E превосходят численные, однако, начиная с $t = 2$ (здесь и далее размерность времени в секундах опускается), относительное положение кривых меняется. Начиная с этого момента до развития неустойчивости энергия течения по результатам моделирования существенно превосходит аналитическую зависимость. Таким образом, при измельчении сетки кривые кинетической энергии приближаются к асимптотической кривой сверху. Разрушение регулярной вихревой структуры приводит к более чем двукратному падению кинетической энергии. В дальнейшем происходит эволюция поля завихренности под воздействием вынуждающей силы. Последующая балансировка подводимой мощности приводит к тому, что E колеблется относительно некоторого равновесного значения. На достаточно подробных сетках кривые кинетической энергии совпадают с аналитическим решением до момента разрушения устойчивого состояния.

При малых значениях вязкости (рис. 1, а) аналитическая кривая всегда превосходит численный результат. Здесь измельчение сетки также приводит к увеличению времени устойчивого состояния системы. Малая вязкость способствует конвективному переносу с меньшей диссипацией; таким образом, наблюдается их более равномерная «подкачка» со стороны действующей гармонической силы.

В случае больших чисел Рейнольдса (рис. 1, б) можно выполнить разложение экспоненты в (51) по νk^2 , что определяет квадратичную аналитическую зависимость $E = \frac{G^2 t^2}{2}$ на ламинарном

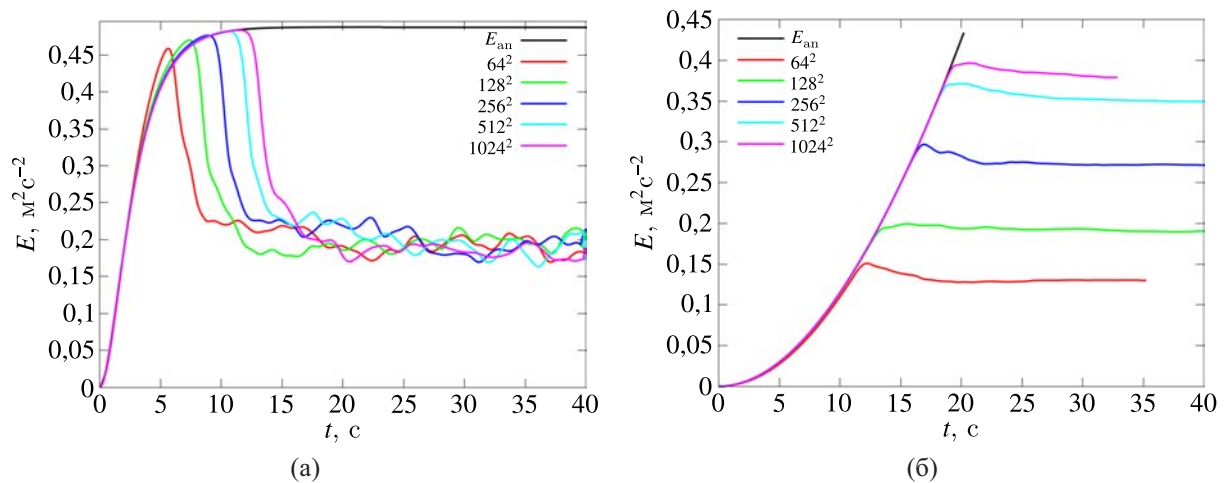


Рис. 1. Зависимость интеграла кинетической энергии E от времени, рассчитанная по схеме КАБАРЕ на последовательности сеток для расчета 1, $Re_a = 1034$ (а), расчета 2, $Re_a = 387850$ (б). Цифры в легенде указывают количество точек равномерной сетки (ячеек). Черная кривая отмечает поведение аналитического решения

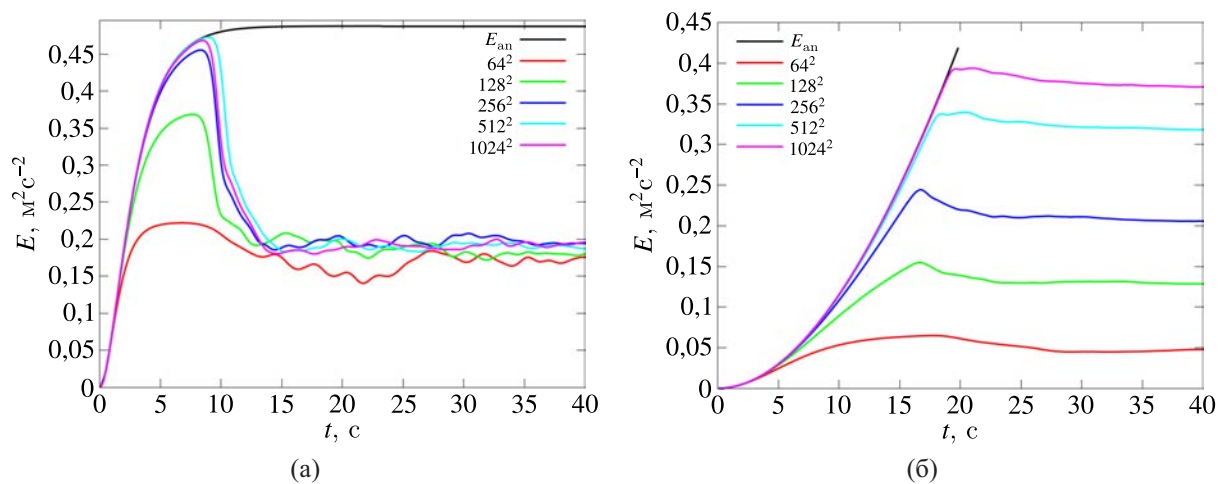


Рис. 2. Зависимость интеграла кинетической энергии E от времени, полученная с помощью OpenFOAM на последовательности сеток для $Re_a = 1034$ (а) и $Re_a = 387850$ (б). Цифры в легенде указывают количество точек равномерной сетки (ячеек). Черная кривая отмечает поведение аналитического решения

(начальном) этапе эволюции. Более высокое число Рейнольдса, очевидно, приводит к большому диапазону пространственных масштабов, что затрудняет (замедляет) процесс сеточной сходимости. В дальнейшем этот факт можно продемонстрировать на примере интеграла палиндромии. Результаты OpenFOAM при низких числах Рейнольдса (рис. 2, а), наоборот, всегда приближают снизу кривую кинетической энергии к точным значениям.

Процесс измельчения сетки показывает немонотонную сходимость для выбранных настроек солвера. Говоря о качественном описании результатов моделирования, мы будем предполагать, что наилучшие результаты дает тот численный метод, для которого потеря устойчивости решения происходит позже всего.

С этой точки зрения сетку 512^2 для OpenFOAM можно считать наилучшей. В сравнении со схемой КАБАРЕ для всего набора сеток, здесь разрушение происходит приблизительно на $t = 2$ раньше. На более поздних временах эволюции течения средние значения E для КАБАРЕ

и OpenFOAM колеблются в одном диапазоне. Однако независимо от сетки схема КАБАРЕ дает более резкие пульсации E (закачка энергии происходит более интенсивно).

Для расчета при больших Re_a OpenFOAM демонстрирует существенное отклонение от аналитической кривой (рис. 2, б). Удовлетворительные результаты можно получить на сетке 512^2 . Так как развитие неустойчивости происходит в различные моменты времени, это определяет общую величину кинетической энергии в потоке. По мере измельчения сетки она увеличивается в семь раз (для схемы КАБАРЕ — в три раза).

На рис. 3, а показана зависимость кинетической энергии по результатам расчета методом МакКормака для $Re_a = 1034$, а также дополнительно показано сравнение с аналитической кривой и результатами схемы КАБАРЕ на сетке 64^2 . Обращает на себя внимание, что регулярное распределение разрушается существенно позже, чем в случае двух других численных методов. Измельчение сетки приводит к уменьшению времени существования регулярной системы. Наилучшее приближение к аналитической кривой дает сетка 512^2 .

При высоком Re_a (рис. 3, б) расчеты на грубых сетках (64^2 , 128^2) приводят к развалу течения и остановке солвера. При дальнейшем измельчении сетки устойчивость солвера сохраняется на всем времени расчета, однако и в этом случае дробление приводит к небольшому уменьшению кинетической энергии течения вследствие более раннего развития неустойчивости.

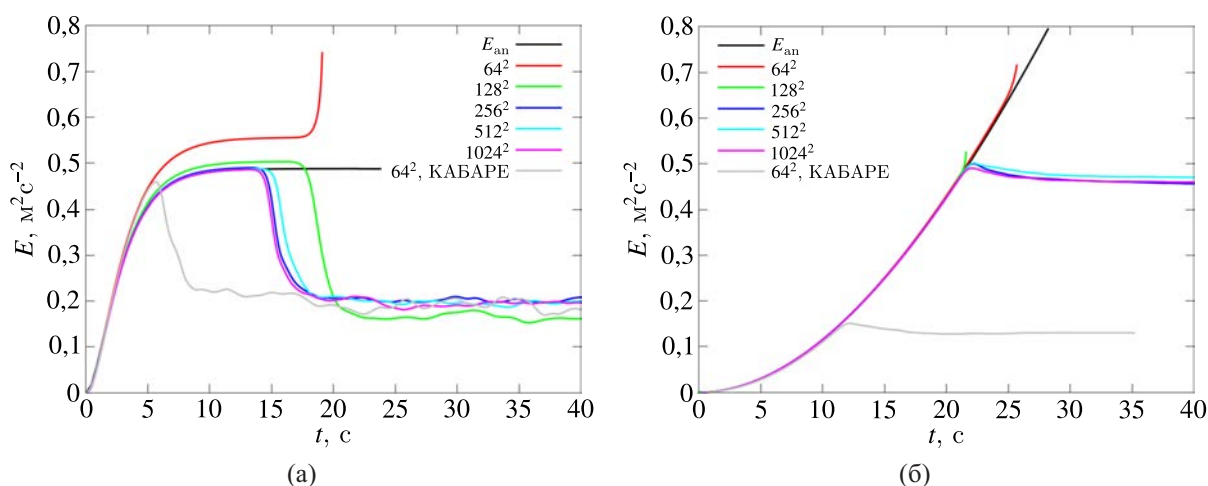


Рис. 3. Зависимость интеграла кинетической энергии E от времени, полученная с помощью метода МакКормака на последовательности сеток для случая $Re_a = 1034$ (а) и расчета с $Re_a = 387850$ (б). Цифры в легенде указывают количество точек равномерной сетки (ячеек). Черная кривая отмечает поведение аналитического решения

Можно определить характерное число Рейнольдса и по максимальному значению кинетической энергии как $Re_E = \frac{\sqrt{E}L}{\nu}$. Тогда $Re_E \sim 500$ ($Re_a = 1034$) и $Re_E \sim 40\,000$ ($Re_a = 387850$). Откуда, в частности, можно оценить соотношения масштабов в каскаде двумерной турбулентности для течения с большим числом Рейнольдса $\frac{l}{\eta} \sim 200$ ($\mu = 0,01$), где l, η — интегральный и колмогоровский масштабы соответственно. Таким образом, минимально допустимая сетка должна иметь около 1024^2 ячеек (существование мелкомасштабных долгоживущих образований, т. е. когерентных структур, не учитывается). Заметим также, что подобное определение числа Рейнольдса не является показательным, так как не учитывает структуру течения.

Скорость диссипации кинетической энергии

В данном разделе скорость диссипации $\varepsilon = \frac{dE}{dt}$ обсуждается на основе результатов схемы КАБАРЕ и пакета OpenFOAM. В случае развитой турбулентности в несжимаемой среде эта

величина пропорциональна интегральной энтропии, однако в данной задаче это равенство не соблюдается вследствие постоянной подкачки энергии с помощью вынуждающей силы. Графики ε обнаруживают существенное различие в развитии хаотизации регулярного распределения вихрей при $Re_a = 1034$, в OpenFOAM это происходит в окрестности $t = 10$. Для схемы КАБАРЕ момент $\min\{\varepsilon\}$, соответствующий минимальной диссипации, смещается в сторону большего t при измельчении сетки.

Дифференцирование аналитического выражения для кинетической энергии дает

$$\varepsilon = \frac{G^2}{\nu k^2} (1 - e^{-\nu k^2 t}) e^{-\nu k^2 t}. \quad (52)$$

Кривые ε (рис. 4) для схемы КАБАРЕ не обнаруживают осцилляций вследствие влияния малой сжимаемости. Кривые, полученные по результатам моделирования в OpenFOAM, представлены на рис. 5.

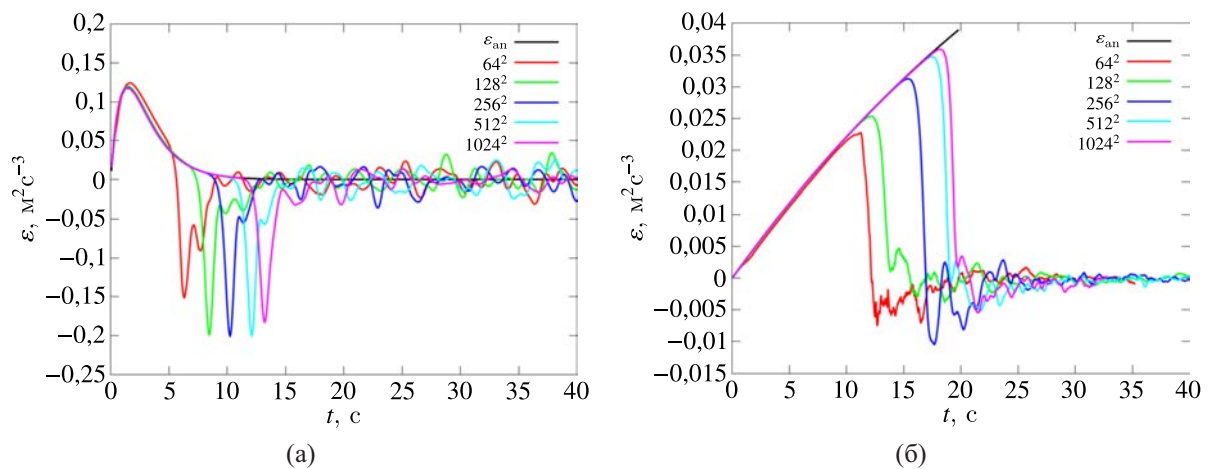


Рис. 4. Скорость диссипации кинетической энергии ε , получаемая непосредственным дифференцированием результатов схемы КАБАРЕ на последовательности сеток для расчета 1 — $Re_a = 1034$ (а), расчета 2 — $Re_a = 387850$ (б). Цифры в легенде указывают количество точек равномерной сетки (ячеек). Черная кривая отмечает поведение аналитического решения

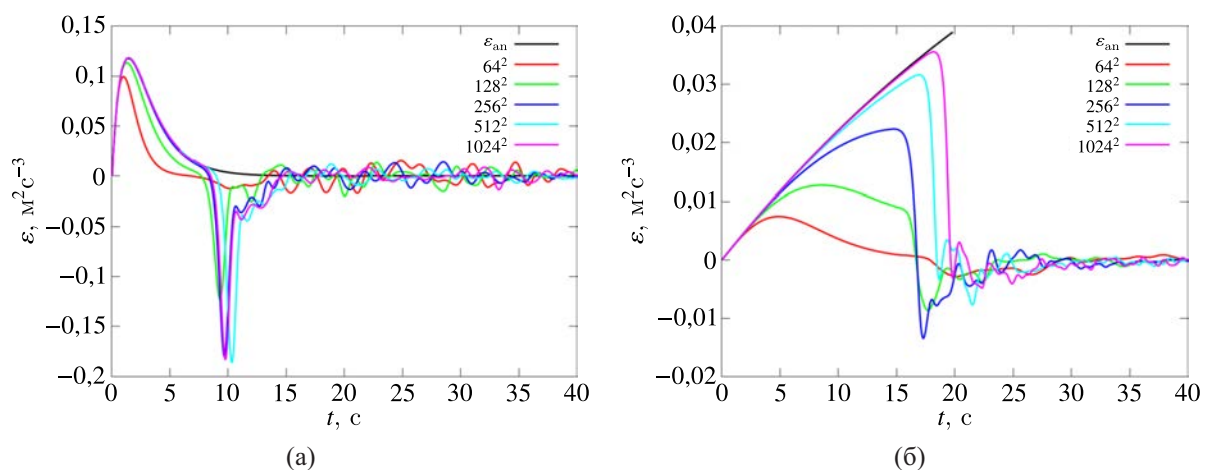


Рис. 5. Скорость диссипации кинетической энергии ε , получаемая непосредственным дифференцированием результатов OpenFOAM на последовательности сеток для $Re_a = 1034$ (а) и $Re_a = 387850$ (б). Цифры в легенде указывают количество точек равномерной сетки (ячеек). Черная кривая отмечает поведение аналитического решения

Скорость диссипации вследствие сдвиговой вязкости

Вклад сдвиговой вязкости в общий процесс диссипации можно рассчитать с помощью соотношений

$$\varepsilon_2 = \frac{2\mu t_0}{\rho_0 U_0 L^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} S_{ij} S_{ij} dx dy, \quad (53)$$

где

$$S_{ij} S_{ij} = \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial y} \right)^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right)^2. \quad (54)$$

Пусть характерная скорость $U_0 = 1$, тогда $t_0 = 2\pi$ и

$$\varepsilon_2 = 2\pi\nu \left(\frac{G}{\nu k} \right)^2 (1 - e^{-\nu k^2 t})^2. \quad (55)$$

Выражение для скорости диссипации можно переписать и в размерном виде:

$$\widehat{\varepsilon}_2 = \frac{G^2}{\nu k^2} (1 - e^{-\nu k^2 t})^2. \quad (56)$$

Результаты, полученные по схеме КАБАРЕ (рис. 6) и OpenFOAM (рис. 7), оказываются в значительной степени подобными как для малого, так и для большого Re_a . Для схемы КАБАРЕ локальный максимум ε_2 лежит ближе к аналитической кривой и является более резким.

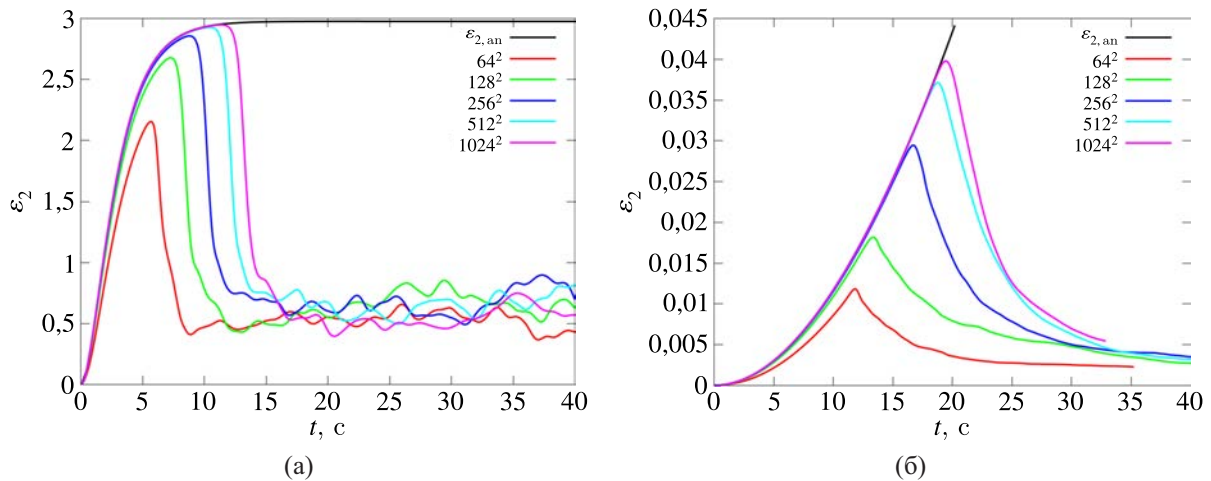


Рис. 6. Зависимость скорости вязкой диссипации ε_2 от времени, полученная по схеме КАБАРЕ на последовательности сеток для малого Re_a (а) и большого Re_a (б). Для случая меньшего числа Рейнольдса можно говорить о достижении сходимости по этой величине. Поведение кривых для двух случаев оказывается похожим. Цифры в легенде указывают количество точек равномерной сетки (ячеек). Черная кривая отмечает поведение аналитического решения

Дилатационная диссипация

В случае использования приближения слабой сжимаемости, как в данной реализации схемы КАБАРЕ, необходимо оценить вклад дилатационной компоненты в общий процесс диссипации:

$$\varepsilon_3 = -\frac{1}{4\pi^2 \rho_0} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} p \nabla \cdot \vec{V} dx dy. \quad (57)$$

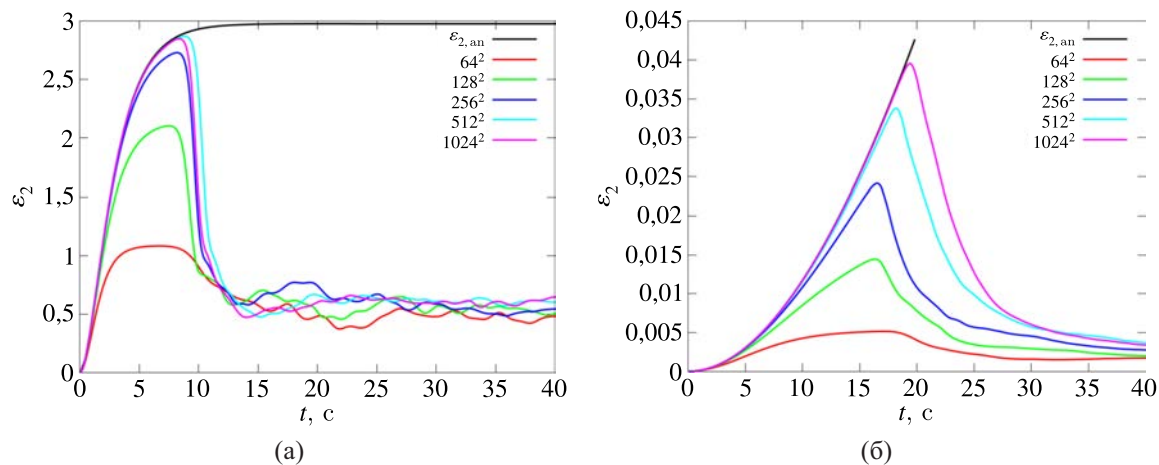


Рис. 7. Зависимость скорости вязкой диссипации ε_2 от времени по результатам моделирования OpenFOAM для расчета с $Re_a = 1034$ (а), а также с $Re_a = 387850$ (б). Цифры в легенде указывают количество точек равномерной сетки (ячеек). Черная кривая отмечает поведение аналитического решения

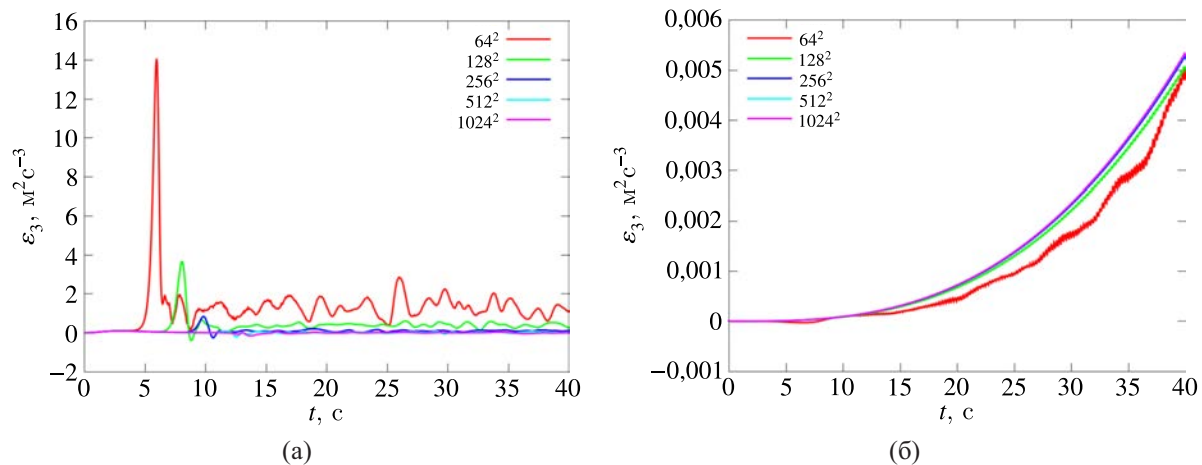


Рис. 8. Зависимость скорости дилатационной диссипации ε_3 от времени, полученная на последовательности сеток для расчета с $Re_a = 1034$ (а), расчета с $Re_a = 387850$ (б). Цифры в легенде указывают количество точек равномерной сетки (ячеек)

Для малого числа $Re_a = 1034$ (рис. 8, б) хаотизация приводит к резкому пику дилатационной диссипации $\varepsilon_3 \sim 10$, после которого ε_3 осциллирует около $\varepsilon_3 \sim 1$. Измельчение сетки приводит к падению пиковых и средних значений в 5–7 раз при переходе от сетки к сетке. На сетке 1024^2 наблюдаются мелкомасштабные осцилляции $|\varepsilon_3| \sim 5 \cdot 10^{-2}$. Амплитуда этих колебаний постоянно меняется, характерный период оказывается достаточно большим: $T = 2$. Таким образом, сгущение сетки приводит к уменьшению дилатационной диссипации.

Для большого $Re_a = 387850$ (рис. 8, а) величина ε_3 постоянно растет с увеличением t . Начиная с сетки 256^3 , основная зависимость ($\varepsilon_3 \sim t^3$) оказывается практически неизменной. На эту зависимость накладываются мелкомасштабные осцилляции, амплитуда которых уменьшается при сгущении сетки, а их период не зависит от пространственного разрешения ($T = 0,25$).

Невязка скорости диссипации кинетической энергии, обусловленная численной ошибкой

На примере результатов расчетов по схеме КАБАРЕ и в пакете OpenFOAM рассмотрим связь различных энергетических характеристик течения, таких как: ε — скорость диссипации

кинетической энергии, вычисляемая ее непосредственным дифференцированием по времени, W — мощность, вкладываемая в течение, ε_2 — гидродинамическая диссипация, ε_3 — дилатационная диссипация (если используется модель слабой сжимаемости), ε_{res} — невязка численной диссипации, обусловленная численной ошибкой, которые связаны соотношением

$$\varepsilon = -\varepsilon_2 - \varepsilon_3 + \varepsilon_{\text{res}} + W. \quad (58)$$

В исходной постановке выражение выше включает только три слагаемых (W , ε , ε_2) и является справедливым в том числе и для аналитических выражений:

$$\begin{aligned} W &= \frac{G^2}{\nu k^2} (1 - e^{-\nu k^2 t}), \\ \widehat{\varepsilon} &= \frac{G^2}{\nu k^2} (e^{-\nu k^2 t} - e^{-2\nu k^2 t}), \\ \widehat{\varepsilon}_2 &= \frac{G^2}{\nu k^2} (1 - e^{-\nu k^2 t})^2. \end{aligned} \quad (59)$$

Таким образом, основываясь на результатах расчетов, мы можем в явном виде выделить вклад численной диссипации ε_{res} . Заметим также, что в данном случае мы оперируем размерными величинами.

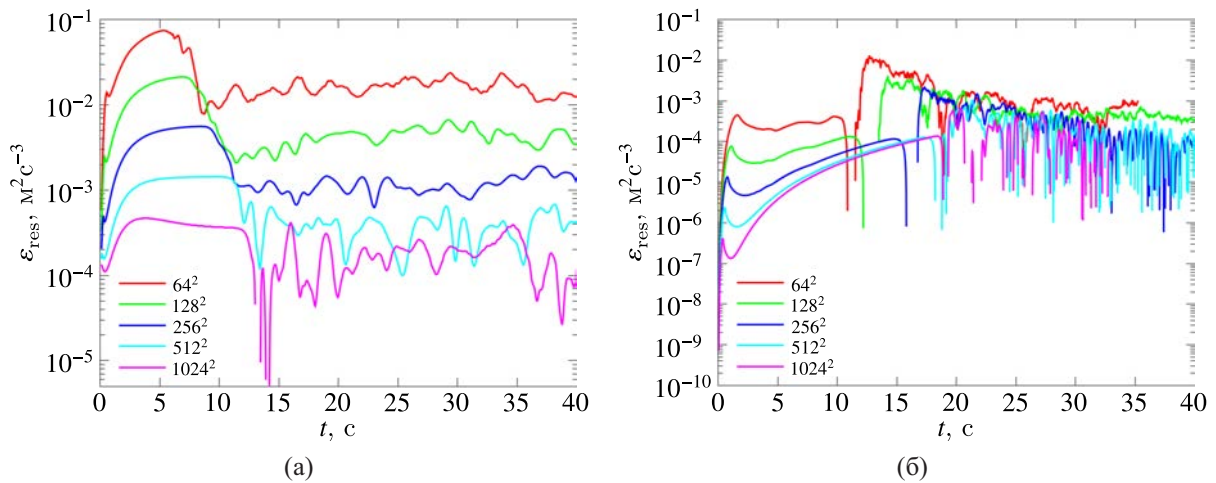


Рис. 9. Невязка скорости диссипации кинетической энергии ε_{res} , полученная на основе результатов схемы КАБАРЕ для расчета 1 (а), расчета 2 (б). Цифры в легенде указывают количество точек равномерной сетки (ячеек)

При $Re_a = 1034$ для схемы КАБАРЕ (рис. 9, а) можно наблюдать немонотонность, связанную с появлением локального экстремума ($t \approx 0,25$, $\varepsilon_{\text{res}} \sim 5 \cdot 10^{-7}$ — для сетки 1024^2). После короткого спада ε_{res} опять нарастает, увеличиваясь на порядок за время $\Delta t = 3 \dots 3,5$, а затем остается постоянной до момента начала резкой диссипации энергии (хаотизации течения). После чего происходит резкое уменьшение, для группы сеток (256^2 , 512^2 , 1024^2) достигая значения $\varepsilon_{\text{res}} \sim 10^{-4}$. После хаотизации течения ε_{res} имеет резкие осцилляции в пределах $|\varepsilon_{\text{res}}| \sim 2,5 \cdot 10^{-4}$. Таким образом, можно сказать, что в ε_{res} учитывается и вклад дилатационной компоненты. Осцилляции являются гармоническими с периодом $T = 0,5$. В тоже время кривые ε_3 имеют осцилляции с периодом $T = 0,25$, не зависящим от сетки. Оказывается, что на мелких сетках основной вклад в невязку ε_{res} дает дилатационная диссипация, однако ее вклад в энергетический баланс в среднем за период достаточно мал. На этапе хаотического течения невязка колеблется в пределах $|\varepsilon_{\text{res}}| \lesssim 3 \cdot 10^{-4}$.

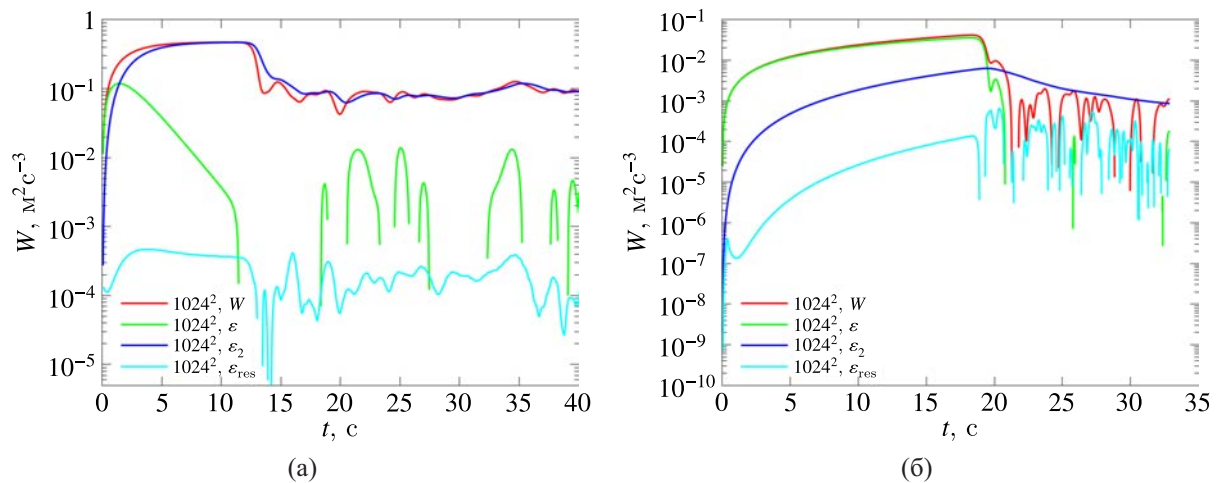


Рис. 10. Сравнение интегральных кривых мощности W , скорости диссипации кинетической энергии ε , гидродинамической диссипации ε_2 и численной диссипации ε_{res} , полученных на основе результатов схемы КАБАРЕ для случая $\text{Re}_a = 1034$ (а) и для $\text{Re}_a = 387850$ (б). Цифры в легенде указывают количество точек равномерной сетки (ячеек)

На рис. 10, а, б для сравнения приведен вклад в энергетический баланс всех слагаемых уравнения (59) (сетка 1024^2). Видно, что кривая W является суммой ε , ε_2 , ε_{res} . Вклад ε_{res} оказывается приблизительно в 5000 и 50 раз меньше для ε_1 для $\text{Re}_a = 1034$ и $\text{Re}_a = 387850$ соответственно.

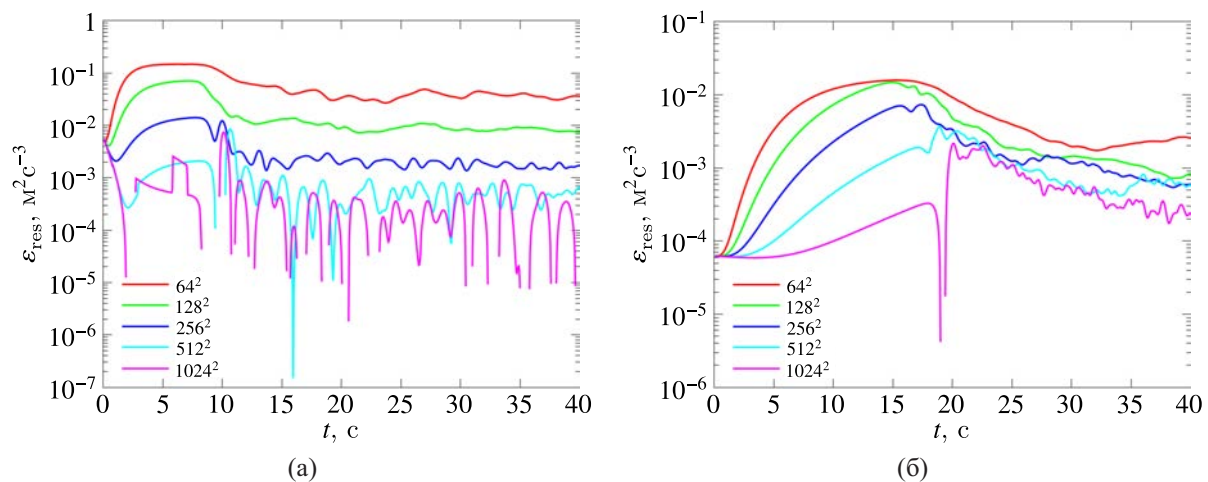


Рис. 11. Невязка скорости диссипации кинетической энергии ε_{res} , полученная на основе результатов OpenFOAM для расчета 1, $\text{Re}_a = 1034$ (а), расчета 2, $\text{Re}_a = 387850$ (б). Цифры в легенде указывают количество точек равномерной сетки (ячеек)

Полезно сравнить результаты схемы КАБАРЕ и OpenFOAM (рис. 11). Последний использует модель несжимаемой жидкости, и в ε_{res} отсутствует вклад ε_3 . В случае малого Re_a измельчение сетки от 64^2 до 256^2 приводит к уменьшению среднего ε_{res} в 5–7 раз. На мелких сетках (512^2 , 1024^2) появляются мелкомасштабные осцилляции ε_{res} с амплитудой 10^{-5} – 10^{-4} , сопровождаемые переходом ε_{res} через ноль.

Для $\text{Re}_a = 387850$ ε_{res} возрастает на участке регулярной эволюции течения, а после хаотизации медленно спадает. На этот общий тренд накладываются мелкомасштабные осцилляции.

На участке хаотической эволюции измельчение сетки дает уменьшение ε_{res} от $5 \cdot 10^{-2}$ до $5 \cdot 10^{-4}$. Отметим, что переход от 512^2 к 1024^2 не приводит к существенному уменьшению ε_{res} , что, возможно, является следствием других настроек солвера (допуска tolerance и т. д.). Осцилляции ε_{res} становятся более заметными при измельчении сетки, что, скорее всего, связано с общим уменьшением среднего ε_{res} .

Интегральная энтропия

Интеграл энтропии можно рассматривать как меру вихреразрешающей способности численного метода, он находится по известному распределению завихренности:

$$\omega = \frac{G}{\nu k} (\sin(ky) + \sin(kx)) \times (1 - e^{-\nu k^2 t}), \quad (60)$$

что дает

$$\widehat{\zeta} = \frac{1}{2} \frac{G^2}{\nu^2 k^2} \cdot 4\pi^2 \cdot (1 - e^{-\nu k^2 t})^2. \quad (61)$$

Нормируя интеграл на площадь расчетной области, получим

$$\zeta = \frac{1}{2} \frac{G^2}{\nu^2 k^2} (1 - e^{-\nu k^2 t})^2, \quad (62)$$

в случае больших чисел Рейнольдса теоретическая зависимость имеет вид

$$\zeta = \frac{(Gkt)^2}{2}.$$

Интегральная энтропия строится на основе сеточного ротора со вторым порядком точности, а также последующим интегрированием методом центральных прямоугольников.

Данная величина является мерой качества разрешения вихревых структур: чем больше точек расчетной сетки, тем более мелкомасштабные вихревые структуры могут быть реализованы в расчете. Здесь стоит отметить, что энтропия в двумерном случае по физическому смыслу выступает в качестве аналога кинетической энергии турбулентности в трехмерном случае.

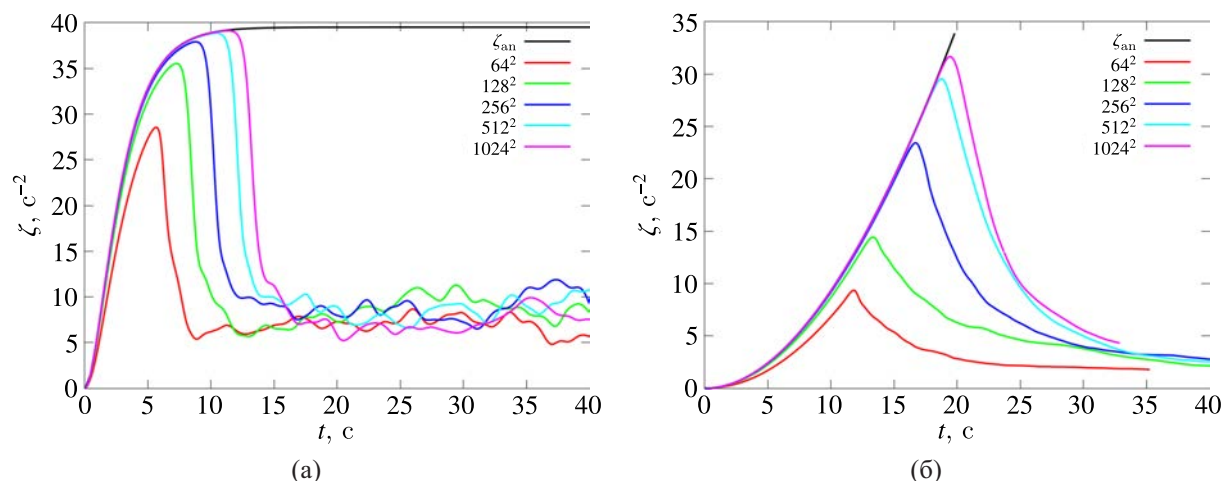


Рис. 12. Зависимость интеграла энтропии ζ от времени, рассчитанная на основе результатов схемы КА-БАРЕ, полученных на последовательности сеток при начальных условиях расчета 1, $Re_a = 1034$ (а), расчета 2, $Re_a = 387850$ (б). Цифры в легенде указывают количество точек равномерной сетки (ячеек). Черная кривая отмечает поведение аналитического решения

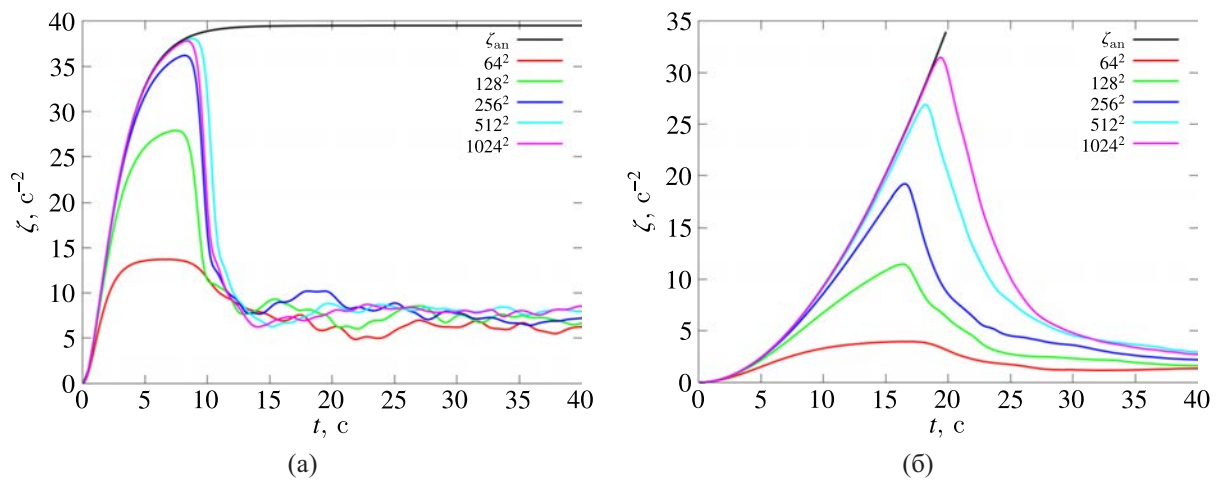


Рис. 13. Интегральная энтропия, полученная с помощью OpenFOAM на последовательности сеток для расчета 1, $Re_a = 1034$ (а), расчета 2, $Re_a = 387850$ (б). Цифры в легенде указывают количество точек равномерной сетки (ячеек). Черная кривая отмечает поведение аналитического решения

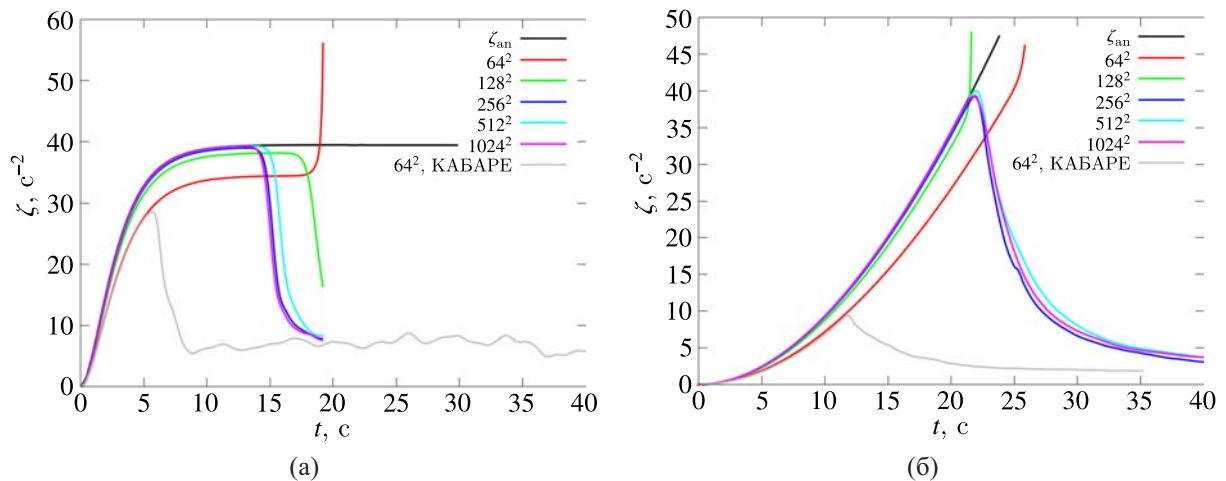


Рис. 14. Интегральная энтропия, полученная с помощью метода МакКормака на последовательности сеток для расчета 1, $Re_a = 1034$ (а), расчета 2, $Re_a = 387850$ (б). Цифры в легенде указывают количество точек равномерной сетки (ячеек). Черная кривая отмечает поведение аналитического решения

Для схемы КАБАРЕ в обоих случаях кривые ζ оказываются ниже аналитических значений (рис. 12). Отметим также, что разброс значений ζ на поздних временах эволюции для различных сеток оказывается существенно меньше, чем для кинетической энергии.

Результаты OpenFOAM для обоих режимов оказываются полностью подобными поведению E (рис. 13). Заметим также хорошее совпадение максимумов ζ на сетке 1024^2 для OpenFOAM и схемы КАБАРЕ.

Расчеты по схеме МакКормака также имеют сходство с кривыми кинетической энергии: измельчение сетки приводит к уменьшению интегральной энтропии. Аналогичная ситуация наблюдается и при большем Re_a , здесь наилучшее приближение получается на сетке 512^2 (рис. 14).

Палинстрофия

При исследовании двумерной турбулентности целесообразным является расчет интеграла палинстрофии, который является количественной мерой филаментации, т. е. производства гради-

ента завихренности. По известному распределению ω найдем значение градиента завихренности, что дает итоговое выражение для P :

$$\widehat{P} = 2\pi^2 \frac{G^2}{\nu^2} \times (1 - e^{-\nu k^2 t})^2. \quad (63)$$

Нормируя на площадь расчетной области, получим выражение для P :

$$P = \frac{1}{2} \frac{G^2}{\nu^2} (1 - e^{-\nu k^2 t})^2. \quad (64)$$

Эволюция этой величины представлена на рис. 15. Отметим, что асимптотическое значение P не зависит от номера гармоники k .

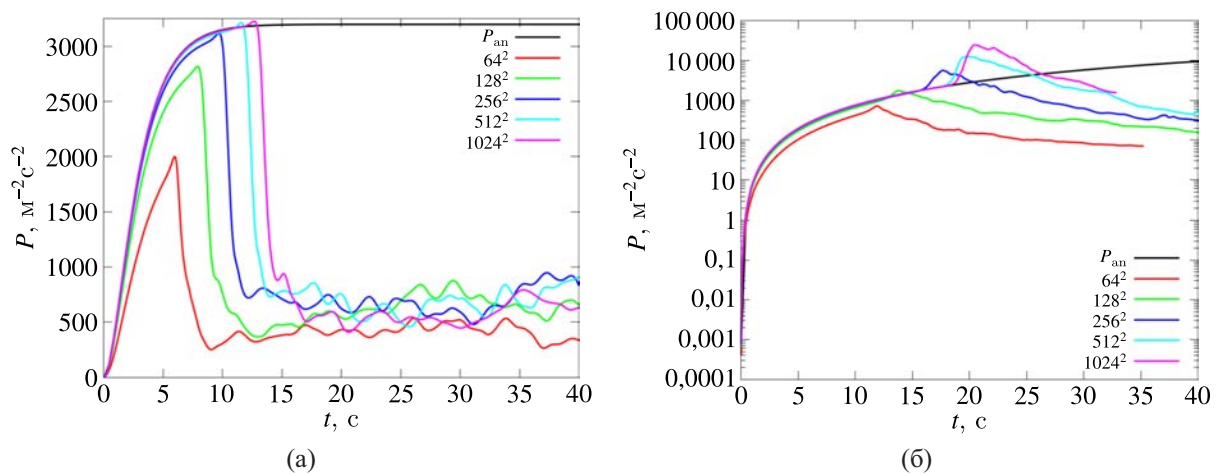


Рис. 15. Зависимость интеграла палинстрофии P от времени, полученная на основе результатов схемы КАБАРЕ, рассчитанных на последовательности сеток для расчета 1, $Re_a = 1034$ (а), расчета 2, $Re_a = 387850$ (б). Цифры в легенде указывают количество точек равномерной сетки (ячеек). Черная кривая отмечает поведение аналитического решения

Аналитические кривые описываются зависимостью, схожей с кинетической энергией, это определяет подобие кривых P для малого числа Рейнольдса $Re_a = 1034$ (рис. 15, а) и E (рис. 1, а). Измельчение сетки приближает решение для P к аналитической кривой. Однако можно заметить, что при любом числе точек имеется характерное обострение P , то есть происходит дополнительное увеличение градиентов завихренности, за которым следует резкий спад, связанный с хаотизацией течения. При $Re_a = 387850$ (рис. 15, б) разрушение регулярной системы вихрей приводит к «взрывному» росту интегральной палинстрофии. В частности, на самой мелкой сетке (1024^2) максимальное P по результатам моделирования превышает аналитическое решение приблизительно в 8,5 раз. Результаты, полученные в OpenFOAM на различных сетках (рис. 16), демонстрируют подобие величинам, рассмотренным ранее. Для малого Re_a наилучшей сеткой является 512^2 и 1024^2 . Для большого Re_a наблюдается монотонное поведение P в зависимости от количества ячеек расчетной сетки. Максимальные значения соответствуют сетке с 1024^2 ячейками ($P = 18000$). Хаотизация приводит к увеличению P приблизительно в 6,2 раза.

Для схемы МакКормака при малых числах Рейнольдса Re_a измельчение сетки приводит к тому, что P следует аналитической кривой до момента хаотизации течения, при этом ее значения не превышают точное решение. Для сравнения на рис. 17, а приведены результаты схемы КАБАРЕ для самой грубой сетки 64^2 , которая показывает дополнительное обострение P . После хаотизации течения в схеме МакКормака значения P слабо зависят от сетки (256^2 , 512^2 , 1024^2).

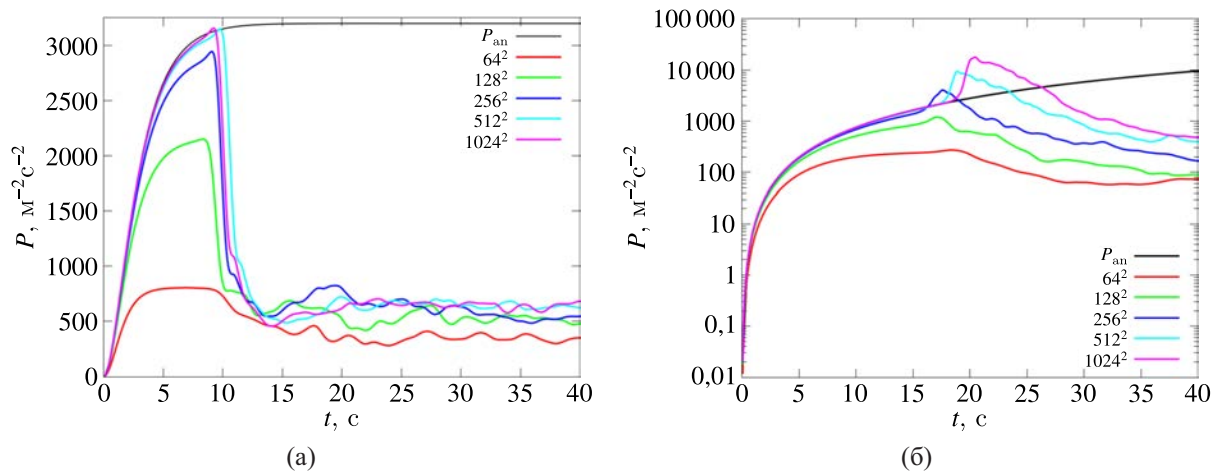


Рис. 16. Зависимость палинстрофии, полученная на основе результатов OpenFOAM на последовательности сеток для расчета 1, $Re_a = 1034$ (а), расчета 2, $Re_a = 387850$ (б). Цифры в легенде указывают количество точек равномерной сетки (ячеек). Черная кривая отмечает поведение аналитического решения

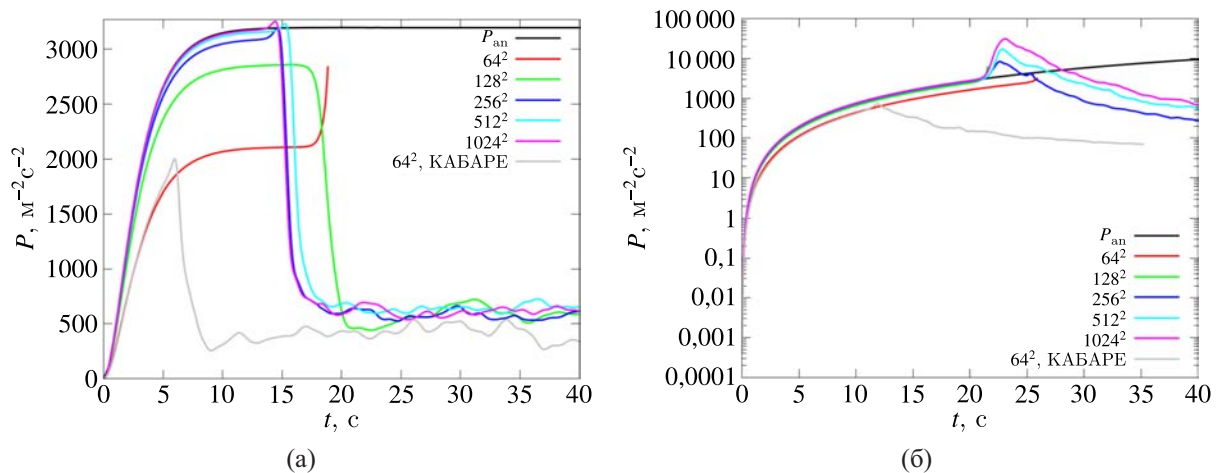


Рис. 17. Зависимость палинстрофии, полученная с помощью метода МакКормака на последовательности сеток для расчета 1, $Re_a = 1034$ (а), расчета 2, $Re_a = 387850$ (б). Цифры в легенде указывают количество точек равномерной сетки (ячеек) в одном направлении. Черная кривая отмечает поведение аналитического решения

Для большого числа Рейнольдса Re_a (рис. 17, б) расчеты не на всех сетках являются успешными (64^2 , 128^2). Дальнейшее измельчение приводит к нормальному выполнению и регулярному поведению кривых P . Значения P в максимуме ($P = 32\,000$) превышают аналогичные, полученные другими методами.

Заключение

Исследование воздействия вынуждающей объемной гармонической силы на жидкость показало существование аналитического решения для распределения скорости, давления и их производных, полученные распределения представляют «паркет» из вихрей противоположного вращения, расположенных в шахматном порядке вдоль координатных направлений. В случае постоянно действующей силы поле скорости стремится к своим асимптотическим значениям

как $(1 - \exp(-vk^2t))$. Асимптотический режим определяется следующими характерными параметрами: скоростью $U_a = \frac{G}{vk^2}$, числом Рейнольдса $Re_a = \frac{2\pi G}{v^2k^2}$, а также временем выхода на режим $T_a = \frac{1}{vk^2}$. Проведение численного моделирования с помощью свободно распространяемого ПО OpenFOAM (модель несжимаемой среды), численных схем КАБАРЕ и МакКормака (использующих приближение слабой сжимаемости) показало существенное отличие в сравнении с аналитическими результатами, которое заключается в разрушении регулярного течения, приводящего к возникновению хаотического поля завихренности.

Начальный момент, скорость развития неустойчивости зависят от численного метода, а также количества ячеек расчетной сетки. Примечательно, что хаотизация поля течения наблюдается как при малых, так и при больших Re_a , что является существенным отличием решаемой задачи от плоского вихря Тейлора – Грина. Для последнего могут наблюдаться два варианта распада (ламинарный или турбулентный) в зависимости от числа Рейнольдса.

Особенности эволюции течения исследовались на основе интегральных характеристик: кинетической энергии E , энтропии ζ и палистрофии P . Общим свойством этих кривых является существование трех участков. Первый участок связан с регулярной эволюцией течения, при которой происходит усиление интенсивности вихрей. Расчетные кривые следуют за аналитическим результатом, а измельчение сетки приводит к улучшению их совпадения. На втором участке происходит медленное отклонение кривых от аналитических значений, которое завершается участком с большой производной по времени (резкий спад или рост). Примечательно, что отклонение интегралов, вычисленных по расчетной области, происходит монотонно, а анализ двумерных распределений не показывает появления возмущающих гармоник, приводящих к развитию неустойчивости. На этом же переходном участке начинают наблюдаться сеточные немонотонности: для OpenFOAM и схемы МакКормака наиболее позднее разрушение течения происходит не на самой мелкой сетке (1024^2), а на более грубых. Третий участок связан с хаотической эволюцией течения и зависит от длительности интервала ламинарной эволюции. Обратим внимание на существенные отличия этого интервала для различных Re_a . В частности, для кинетической энергии E значения осциллируют в окрестности $E \sim 0,2$ для всех численных методов. Таким образом, при малом Re_a зависимость от момента начала хаотизации оказывается несущественной.

Отметим, что асимптотическое поведение при малых значениях кинематической вязкости допускает разложение экспоненциальной зависимости от времени, что дает линейный рост некоторых величин. Для большого числа Рейнольдса момент начала хаотизации определяет количество энергии, переданной в течение объемной силой. В продолжение анализа энергетического баланса течения мы рассмотрели набор величин, которые позволяют судить и о диссипативных характеристиках численных методов. Процесс закачки энергии связан с мощностью W вынуждающей силы, в то время как диссипация представлена суммой слагаемых, связанных с непосредственным увеличением кинетической энергии (ε), вязкой диссипацией (ε_2), дилатационной диссипацией (ε_3 — для методов со слабой сжимаемостью), а также численной диссипации (ε_{res}). Для результатов, полученных по схеме КАБАРЕ и ПО OpenFOAM, на основе балансовых соотношений установлено, что последовательное измельчение сетки приводит к уменьшению ε_{res} в 5–7 раз при переходе от сетки к сетке. Для самой подробной из них (1024^2) численная диссипация оказывается на несколько порядков меньше своего гидродинамического аналога. Можно заключить, что диссипативные характеристики обоих методов не оказывают существенного влияния на процесс эволюции завихренности. Как следует из представленных результатов, процесс хаотизации наблюдается для любого из численных методов, при этом она может происходить и на поздних временах регулярной эволюции течения, когда локальные аналитические значения временных производных уменьшаются. Для исследования процессов производства завихренности мы использовали две интегральные величины, определяемые на ее основе, — интегральные

энстрофию (ζ) и палинстрофию (P). Постановка задачи с периодическими граничными условиями позволяет установить простую связь между ними. Кроме того, ζ может выступать в качестве меры вихреразрешающей способности численного метода, а палинстрофия определяет степень производства мелкомасштабной завихренности. Хаотизация при малых числах Рейнольдса приводит к интенсивному уменьшению энстрофии и быстрому исчезновению мелкомасштабных структур.

При больших числах Рейнольдса уменьшение энстрофии происходит довольно медленно. Однако спад кривых показывает, что вынуждающая сила с большим пространственным периодом не способна поддерживать мелкомасштабное распределение вихрей, и в силу существования каскада в течении сохраняются в основном только крупномасштабные образования.

Данный вывод хорошо подтверждается кривыми палинстрофии, которые показывают активную филаментацию в двумерном хаотическом течении. На относительно небольшом интервале $\Delta t = 10$ (сетка 1024^2) палинстрофия P принимает то же самое значение, что и до хаотизации. Интервал интенсивного производства завихренности занимает около $\Delta t \approx 2$, то есть является весьма кратковременным. Спад после хаотизации характеризуется степенной функцией.

Список литературы (References)

- Головизнин В. М., Самарский А. А. Разностная аппроксимация конвективного переноса с пространственным расщеплением временной производной // Математическое моделирование. — 1998a. — Т. 10, № 1. — С. 86–100.
- Goloviznin V. M., Samarskiy A. A. Raznostnaya approximationsiya konvektivnogo perenosa s prostranstvennym rasshchepleniyem vremennoy proizvodnoy [Difference approximation of convective transport with spatial splitting of the time derivative] // Matematicheskoye modelirovaniye. — 1998a. — Vol. 10, No. 1. — P. 86–100 (in Russian).
- Головизнин В. М., Самарский А. А. Некоторые свойства разностной схемы «КАБАРЕ» // Математическое моделирование. — 1998b. — Т. 10, № 1. — С. 101–166.
- Goloviznin V. M., Samarskiy A. A. Some properties of the difference scheme “CABARET” [Some properties of the difference scheme “CABARET”] // Matematicheskoye modelirovaniye. — 1998b. — Vol. 10, No. 1. — P. 101–166 (in Russian).
- Колмогоров А. Н. Локальная структура турбулентности в несжимаемой вязкой жидкости // ДАН СССР. — 1941a. — Т. 30. — С. 209–303.
- Kolmogorov A. N. Lokal'naya struktura turbulentnosti v neszhimayemoy vyazkoy zhidkosti [Local structure of turbulence in an incompressible viscous fluid] // DAN SSSR. — 1941a. — Vol. 30. — P. 209–303 (in Russian).
- Колмогоров А. Н. Рассеяние энергии при локально изотропной турбулентности // ДАН СССР. — 1941b. — Т. 30, № 1 — С. 19–21.
- Kolmogorov A. N. Rasseyaniye energii pri lokal'no izotropnoy turbulentnosti [Energy dissipation under locally isotropic turbulence] // DAN SSSR. — 1941b. — Vol. 30, No. 1. — P. 19–21 (in Russian).
- Anderson D., Tannehill J. C., Pletcher R. H. Computational fluid mechanics and heat transfer. — Third ed. — Taylor and Francis, 2016.
- Balbus S. A., Hawley J. F. Instability, turbulence, and enhanced transport in accretion disks // Reviews of Modern Physics. — 1998. — Vol. 70, No. 1. — P. 1–53.
- Basdevant C., Legras B., Sadourny R., B  land M. A study of barotropic model flows: intermittency, waves and predictability // Journal of the Atmospheric Sciences. — 1981. — Vol. 38, No. 11. — P. 2305–2326.
- Batchelor G. K. Computation of the energy spectrum in homogeneous two-dimensional turbulence // The Physics of Fluids. — 1969. — Vol. 12, No. 12. — P. 233–239.
- Boffetta G. Energy and enstrophy fluxes in the double cascade of two-dimensional turbulence // Journal of Fluid Mechanics. — 2007. — Vol. 589. — P. 253–260.
- Boffetta G., Musacchio S. Evidence for the double cascade scenario in two-dimensional turbulence // Physical Review E. — 2010. — Vol. 82, No. 1. — P. 016307.
- Bouchet F., Venaille A. Statistical mechanics of two-dimensional and geophysical flows // Physics Reports. — 2012. — Vol. 515, No. 5. — P. 227–295.

- Brandenburg A., Nordlund A. Astrophysical turbulence modeling // Reports on Progress in Physics. — 2011. — Vol. 74, No. 4. — P. 046901.
- Charney J. G. Geostrophic turbulence // Journal of the Atmospheric Sciences. — 1971. — Vol. 28, No. 6. — P. 1087–1095.
- Chertkov M., Connaughton C., Kolokolov I., Lebedev V. Dynamics of energy condensation in two-dimensional turbulence // Physical Review Letters. — 2007. — Vol. 99, No. 8. — P. 084501.
- Couder Y., Chomaz J., Rabaud M. On the hydrodynamics of soap films // Physica D: Nonlinear Phenomena. — 1989. — Vol. 37, No. 1–3. — P. 384–405.
- Farge M., Schneider K., Kevlahan N. Non-Gaussianity and coherent vortex simulation for two-dimensional turbulence using an adaptive orthogonal wavelet basis // Physics of Fluids. — 1999. — Vol. 11, No. 8. — P. 2187–2201.
- Francois N., Xia H., Punzmann H., Shats M. Inverse energy cascade and emergence of large coherent vortices in turbulence driven by faraday waves // Physical Review Letters. — 2013. — Vol. 110, No. 19. — P. 194501.
- Frisch U., Sulem P.-L. Numerical simulation of the inverse cascade in two-dimensional turbulence // The Physics of Fluids. — 1984. — Vol. 27, No. 8. — P. 1921–1923.
- Gage K. S. Evidence for $k^{-5/3}$ law inertial range in mesoscale two-dimensional turbulence // Journal of the Atmospheric Sciences. — 1979. — Vol. 36, No. 10. — P. 1950–1954.
- Gage K. S., Nastrom G. D. Theoretical interpretation of atmospheric wavenumber spectra of wind and temperature observed by commercial aircraft during GASP // Journal of the Atmospheric Sciences. — 1986. — Vol. 43, No. 7. — P. 729–740.
- Galperin B., Nakano H., Huang H.-P., Sukoriansky S. The ubiquitous zonal jets in the atmospheres of giant planets and Earth's oceans // Geophysical Research Letters. — 2004. — Vol. 31, No. 13. — P. 13303.
- Gharib M., Derango P. A liquid film (soap film) tunnel to study two-dimensional laminar and turbulent shear flows // Physica D: Nonlinear Phenomena. — 1989. — Vol. 37, No. 1–3. — P. 406–416.
- Guerrero J. A crash introduction to the finite volume method and discretization schemes in OpenFOAM // OpenFOAM Beginner training session presented at the 15th OpenFOAM workshop. June 22–26, 2020. — Arlington, VA, USA, 2020.
- Hossain M., Matthaeus W. H., Montgomery D. Long-time states of inverse cascades in the presence of a maximum length scale // Journal of Plasma Physics. — 1983. — Vol. 30, No. 3. — P. 479–493.
- Kraichnan R. H. Inertial ranges in two-dimensional turbulence // The Physics of Fluids. — 1967. — Vol. 10, No. 7. — P. 1417–1423.
- Leith C. E. Diffusion approximation for two-dimensional turbulence // The Physics of Fluids. — 1968. — Vol. 11, No. 3. — P. 671–672.
- Kulikov Yu. M., Son E. E. CABARET scheme implementation for free shear layer modeling // Computer Research and Modeling. — 2017. — Vol. 9, No. 6. — P. 881–903.
- Kulikov Yu. M., Son E. E. The CABARET method for a weakly compressible fluid flows in one- and two-dimensional implementations // Journal of Physics: Conference Series. — 2016. — Vol. 774. — P. 012094.
- Lilly D. K. Numerical simulation of two-dimensional turbulence // The Physics of Fluids. — 1969. — Vol. 12, No. 12. — P. II-240–II-249.
- Lilly D. K. Numerical simulation studies of two-dimensional turbulence. I. Models of statistically steady turbulence // Geophysical Fluid Dynamics. — 1972. — Vol. 3, No. 4. — P. 289–319.
- Lilly D. K. Two-dimensional turbulence generated by energy sources at two scales // Journal of the Atmospheric Sciences. — 1989. — Vol. 46, No. 13. — P. 2026–2030.
- MacCormack R. W. The effect of viscosity in hypervelocity impact cratering // Frontiers of Computational Fluid Dynamics. — 2001. — P. 27–43.

- McDonough J.M.* Introductory lectures on turbulence. — CreateSpace Independent Publishing Platform, 2014.
- Moukalled F., Mangani L., Darwish M.* The finite volume method in computational fluid dynamics. An advanced introduction with OpenFOAM and Matlab. — Springer International, 2016.
- Mukhopadhyay B., Afshordi N., Narayan R.* Bypass to turbulence in hydrodynamic accretion disks: an eigenvalue approach // *The Astrophysical Journal*. — 2005. — Vol. 629, No. 1. — P. 383–396.
- Nilsson H.* A look inside icoFoam (and pisoFoam) // MSc/PhD course in CFD with OpenSource software. — Chalmers University of Technology, 2013.
- Orlov A.V., Brazhnikova M.Yu., Levchenko A.A.* Large-scale coherent vortex formation in two-dimensional turbulence // *JETP Letters*. — 2018. — Vol. 107, No. 3. — P. 157–162.
- Paret J., Jullien M.-C., Tabeling P.* Vorticity statistics in the two-dimensional enstrophy cascade // *Physical Review Letters*. — 1999. — Vol. 83, No. 17. — P. 3418–3421.
- Paret J., Marteau D., Paireau O., Tabeling P.* Are flows electromagnetically forced in thin stratified layers two dimensional? // *Physics of Fluids*. — 1997. — Vol. 9, No. 10. — P. 3102–3104.
- Paret J., Tabeling P.* Experimental observation of the two-dimensional inverse energy cascade // *Physical Review Letters*. — 1997. — Vol. 79, No. 21. — P. 4162–4165.
- Paret J., Tabeling P.* Intermittency in the two-dimensional inverse cascade of energy: experimental observations // *Physics of Fluids*. — 1998. — Vol. 10, No. 12. — P. 3126–3136.
- Perlekar P., Pandit R.* Statistically steady turbulence in thin films: direct numerical simulations with Ekman friction // *New Journal of Physics*. — 2009. — Vol. 11, No. 7. — P. 073003.
- Read P.L.* Transition to geostrophic turbulence in the laboratory, and as a paradigm in atmospheres and oceans // *Surveys in Geophysics*. — 2001. — Vol. 22, No. 3. — P. 265–317.
- Rhines P.B.* Geostrophic turbulence // *Annual Review of Fluid Mechanics*. — 1979. — Vol. 11, No. 1. — P. 401–441.
- Richardson L.F., Lynch P.* Weather prediction by numerical process. — Cambridge University Press, 2007.
- Rivera M., Vorobieff P., Ecke R.E.* Turbulence in flowing soap films: velocity, vorticity, and thickness fields // *Physical Review Letters*. — 1998. — Vol. 81, No. 7. — P. 1417–1420.
- Rivera M., Wu X.-L.* External dissipation in driven two-dimensional turbulence // *Physical Review Letters*. — 2000. — Vol. 85, No. 5. — P. 976–979.
- Rivera M., Wu X.-L.* Homogeneity and the inertial range in driven two-dimensional turbulence // *Physics of Fluids*. — 2002. — Vol. 14, No. 9. — P. 3098–3108.
- Rivera M., Wu X.-L., Yeung C.* Universal distribution of centers and saddles in two-dimensional turbulence // *Physical Review Letters*. — 2001. — Vol. 87, No. 4. — P. 044501.
- Rivera M.K., Daniel W.B., Chen S.Y., Ecke R.E.* Energy and enstrophy transfer in decaying two-dimensional turbulence // *Physical Review Letters*. — 2003. — Vol. 90, No. 10. — P. 104502.
- Rutgers M.A.* Forced 2D turbulence: experimental evidence of simultaneous inverse energy and forward enstrophy cascades // *Physical Review Letters*. — 1998. — Vol. 81, No. 11. — P. 2244–2247.
- Scott R.B., Arbic B.K.* Spectral energy fluxes in geostrophic turbulence: implications for ocean energetics // *Journal of Physical Oceanography*. — 2007. — Vol. 37, No. 3. — P. 673–688.
- Scott R.K., Polvani L.M.* Forced-dissipative shallow-water turbulence on the sphere and the atmospheric circulation of the giant planets // *Journal of the Atmospheric Sciences*. — 2007. — Vol. 64, No. 9. — P. 3158–3176.
- Siggia E.D., Aref H.* Point-vortex simulation of the inverse energy cascade in two-dimensional turbulence // *The Physics of Fluids*. — 1981. — Vol. 24, No. 1. — P. 171–173.
- Smith L.M., Yakhot V.* Bose condensation and small-scale structure generation in a random force driven 2D turbulence // *Physical Review Letters*. — 1993. — Vol. 71, No. 3. — P. 352–355.

- Smith L. M., Yakhot V.* Finite-size effects in forced two-dimensional turbulence // *Journal of Fluid Mechanics*. — 1994. — Vol. 274. — P. 115–138.
- Sommeria J.* Experimental study of the two-dimensional inverse energy cascade in a square box // *Journal of Fluid Mechanics*. — 1986. — Vol. 170. — P. 139–168.
- Tran C. V., Bowman J. C.* Robustness of the inverse cascade in two-dimensional turbulence // *Physical Review E*. — 2004. — Vol. 69, No. 3. — P. 168–183.
- Tulloch R., Smith K. S.* A theory for the atmospheric energy spectrum: depth-limited temperature anomalies at the tropopause // *Proceedings of the National Academy of Sciences*. — 2006. — Vol. 103, No. 40. — P. 14690–14694.
- Xia H., Shats M., Falkovich G.* Spectrally condensed turbulence in thin layers // *Physics of Fluids* — 2009. — Vol. 21, No. 12. — P. 125101.

UDC: 532.685

Simulation of two-phase flow in porous media using an inhomogeneous network model

K. Shabbir^{1,a}, O. Ya. Izvekov^{1,b}, A. V. Konyukhov^{1,2,c}

¹Moscow Institute of Physics and Technology,

9 Institutsky lane, Dolgoprudny, Moscow region, 141700, Russia

²Joint Institute for High Temperatures of the Russian Academy of Sciences,
13/2 Izhorskaya st., Moscow, 125412, Russia

E-mail: ^a kafiulshabbir@phystech.edu, ^b izvekov_o@inbox.ru, ^c konyukhov_av@mail.ru

Received 17.10.2023, after completion — 20.05.2024.

Accepted for publication 13.06.2024.

We present an inhomogeneous two-dimensional network model of two-phase flow in porous media. The edges of the network are assumed to be capillary tubes of different radii. We propose a new algorithm for handling phase fluxes at the nodes of this network model. We perform two test problems and show that the two-phase flow in this inhomogeneous network model demonstrates properties that are analogous to those of real porous media: capillary imbibition, dependence of capillary pressure on saturation and effect of capillary forces in two-phase displacement. The two test problems are: the counter-current imbibition and the two-phase displacement in a periodically inhomogeneous porous medium. In the former problem, we implement a network consisting of two regions: a region of low-permeability with thin capillaries surrounded by a region of high-permeability with thick capillaries, initially saturated with wetting and nonwetting incompressible fluids, respectively. Capillary equilibrium is established due to counter-current imbibition by a region. We examine the dependence: of saturation of the wetting fluid with respect to time in the regions, and of capillary pressure on the current saturation. We have obtained a qualitative agreement with the known experimental and theoretical results, which will further allow us to use this network model to verify homogenized models of capillary nonequilibrium. In the latter problem, we consider the two-phase displacement, where the network is initially saturated with non-wetting fluid. Then wetting fluid is injected through a boundary at a constant rate. We analyze the saturation with respect to the axis which is along the applied pressure gradient for various moments in time with various values of coefficients of surface tension. The results show that for lower values of coefficient of surface tension, the wetting fluid prefers to invade through the thicker tubes, and in the case of higher values, through thinner tubes.

Keywords: porous medium, capillary pressure, imbibition, multiphase flow, network model, periodically inhomogeneous media

Citation: *Computer Research and Modeling*, 2024, vol. 16, no. 4, pp. 913–925.

The project was supported by the Russian Science Foundation, grant No. 23-21-00175 (<https://rscf.ru/project/23-21-00175/>).

УДК: 532.685

Моделирование двухфазного течения в пористых средах с использованием неоднородной сетевой модели

К. Шаббир^{1,а}, О. Я. Извеков^{1,б}, А. В. Конюхов^{1,2,с}

¹Московский физико-технический институт,
Россия, 141700, Московская область, г. Долгопрудный, Институтский переулок, д. 9

²Объединенный институт высоких температур РАН,
Россия, 125412, г. Москва, ул. Ижорская, д. 13, стр. 2

E-mail: ^а kafiulshabbir@phystech.edu, ^б izvekov_o@inbox.ru, ^с konyukhov_av@mail.ru

Получено 17.10.2023, после доработки — 20.05.2024.

Принято к публикации 13.06.2024.

Представлена неоднородная двумерная сетевая модель двухфазного течения в пористых средах. Предполагается, что ребра сети представляют собой капиллярные трубки разного радиуса. Предложен новый алгоритм управления фазовыми потоками в узлах этой сетевой модели. Показано, что сетевая модель демонстрирует свойства, аналогичные свойствам реальных пористых сред: капиллярная пропитка, зависимость капиллярного давления от насыщенности и влияние капиллярных сил при двухфазном течении. Было решено две тестовые задачи: противоточная пропитка пористого блока и двухфазное течение в периодически неоднородной пористой среде. В первой задаче реализована сеть, состоящая из двух областей: область с низкой проницаемостью и тонкими капиллярами окружена областью с высокой проницаемостью и толстыми капиллярами, изначально насыщенными смачивающими и несмачивающими несжимаемыми жидкостями соответственно. Капиллярное равновесие устанавливается за счет противоточной пропитки внутренней области. Исследована зависимость насыщенности смачивающей жидкости в областях от времени и капиллярного давления от текущей насыщенности. Получено качественное соответствие известным экспериментальным и теоретическим результатам, что в дальнейшем позволит использовать эту сетевую модель для проверки осредненных моделей капиллярной неравновесности. Во второй задаче рассматривается двухфазное вытеснение, при котором сеть изначально насыщается несмачивающей жидкостью. Затем смачивающая жидкость вводится через границу с постоянным расходом. Анализируется распределение насыщенности вдоль оси, направленной вдоль приложенного градиента давления, для различных моментов времени при различных значениях коэффициентов поверхностного натяжения. Результаты расчетов показывают, что при более низких значениях коэффициента поверхностного натяжения смачивающая жидкость предпочитает проникать через более толстые трубки, а при более высоких значениях — через более тонкие.

Ключевые слова: пористая среда, капиллярное давление, пропитка, многофазный поток, сетевые модели, периодически неоднородные среды

Проект поддержан Российским научным фондом, грант № 23-21-00175 (<https://rscf.ru/project/23-21-00175/>).

1. Introduction

Modeling two-phase flow in porous media is important in a variety of applications in oil production, hydrology, etc [Labed, Bennamoun, Fohr, 2012]. A porous medium consists of a skeleton (usually solid) and voids (also called pores). The voids are connected to each other by capillaries. The voids may contain fluids such as water, oil or gas [Su, Sanchez, Yang, 2012]. The saturation S_k of fluid F_k is defined as the ratio of the volume V_k occupied by the fluid F_k to the total volume of the void space V_{void} :

$$S_k = \frac{V_k}{V_{\text{void}}}. \quad (1)$$

We assume that the void space can be filled with only two fluids. We denote saturation with a more wetting fluid (for example, water in a hydrophilic rock) as S_w , and with a less wetting fluid (for example, oil in a hydrophilic rock) as S_{nw} . Let these fluids completely fill the space of pores and capillaries, then $S_w + S_{nw} = 1$. In what follows, we denote the saturation of the wetting fluid as S . Darcy's law is a continuum law for linear filtration of fluids in a porous medium [Whitaker, 1986]:

$$Q = -\frac{K}{\mu} \nabla P, \quad (2)$$

where Q is the flow rate, K is the permeability, μ is the coefficient of viscosity, and ∇P is the pressure gradient.

Permeability in the case of multiphase flows is traditionally considered to be a function of saturation $K = K(S)$ [Coussy, 2004].

However, this assumption is only valid when the characteristic time of the fluid flow is much greater than the characteristic time of relaxation, which is the time required for redistribution of fluids in the pore and capillary space due to surface tension forces. Here, it is also assumed that the fluid configuration corresponds to minimum surface energy at every moment in time. Thus, the traditional models of fluid filtration in a porous medium are also called equilibrium models. The capillary equilibrium can be disturbed when the saturation changes relatively quickly or the relaxation time to the equilibrium state is sufficiently long. For example, the relaxation time is long for the continuum description of filtration in a fractured-porous medium [Barenblatt, Zheltov, Kochina, 1960; Barenblatt, Patzek, Silin, 2003]. In these cases the assumption that permeability is a function of saturation is insufficient. Advanced models such as [Hassanizadeh, Gray, 1987] and [Hassanizadeh, 2004] take capillary nonequilibrium effects (dynamic effects) into account by having K to also be dependent on the rate of change of saturation:

$$K = K\left(S, \frac{\partial S}{\partial t}\right). \quad (3)$$

However, the process of fluid redistribution in the pore space can occur even at a constant saturation $S = \text{const}$. This fact can be taken into account by including an internal parameter ξ in the arguments of K . The relative permeability is of the form

$$K_\alpha = K_\alpha(S, \xi), \quad (4)$$

and the kinetic equation for the parameter ξ , such that it relaxes to an equilibrium value for a given constant saturation S :

$$\frac{\partial \xi}{\partial t} = \Omega(S, \xi). \quad (5)$$

This approach was implemented by Kondaurov in his works [Kondaurov, 2007; Kondaurov, 2009]. Equations of the form (5) have been developed by [Konyukhov, Pankratov, Voloshin, 2017; Konyukhov, Pankratov, Voloshin, 2019].

In order to better understand the physical meaning of nonequilibrium models and to clarify the parameters included in them it is necessary to consider the movement of fluids at the scale of pores

and capillaries. Common methods for modeling the movement of fluids at the pore scale are: the lattice Boltzmann method [Chen, Doolen, 1998], a direct solution of the Navier – Stokes equation, and network models [Blunt et al., 2013]. Direct modeling gives fairly accurate results on the distribution of velocity, pressure and positions of interfaces but it requires significant computing power and time [Liu et al., 2013]. Network models [Fatt, 1956; Aker et al., 1998; Ramstad, Berg, Thompson, 2019; Shabbir, 2023] allows us to qualitatively reproduce the observed effects with lower computational effort [Meakin, Tartakovsky, 2009]. This paper presents a two-dimensional network model that allows us to reproduce nonequilibrium phenomena during two-phase flow in a porous medium.

2. Numerical model of two-phase flow of incompressible fluids

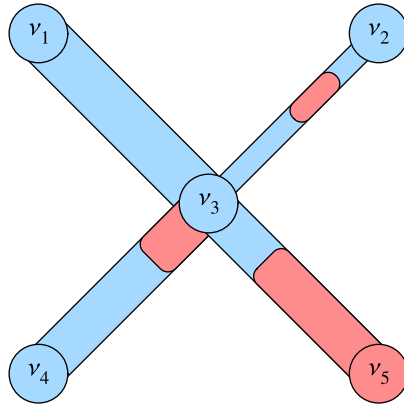


Figure 1. Scheme of the network model. Showing nodes $\{v_k\}$, where $k = (1, 2, 3, 4, 5)$. Each tube connecting 2 nodes v_i and v_j , can have a different radius R_{ij} , and contain a maximum of 2 menisci

We consider a network model of a porous medium, which is a set of nodes connected to each other by capillary tubes. The tubes model the capillary space, and the nodes model the pore space. Each node is connected to 4 neighboring nodes as shown in Fig. 1. A node can be connected to less than 4 nodes if they are located on the boundaries. In what follows, the double index ij denotes quantities related to the capillary τ_{ij} connecting nodes v_i and v_j of the set of nodes $\{v_k\}$, $k = 1, \dots, n$, here n is the total number of nodes in the system. Capillary tubes are considered to be cylinders of circular cross-section and in general have different radii R_{ij} [Shabbir, 2023]. The medium is saturated with two incompressible fluids F_1 and F_2 , with different viscosities μ_1 and μ_2 , and wetting properties. The volumes of the nodes are neglected. The distribution of fluids in the medium is determined by the position of the menisci. In the model under consideration the number of menisci in one tube does not exceed 2. This model has many characteristics similar to [Aker et al., 1998], however, it is different for example, about the choice of geometry of the capillary, they have used hourglass shaped tubes, while we have used cylindrical shaped tubes, which allows us to derive accurate flow rate equations. The volumetric flow rate for a tube τ_{ij} is

$$Q_{ij} = A_{ij}\Delta P_{ij} + B_{ij}, \quad (6)$$

where the pressure difference at the ends of the tube is equal to $\Delta P_{ij} = P_i - P_j$,

$$A_{ij} = \frac{\pi R_{ij}^4}{8M_{ij}l}, \quad (7)$$

$$B_{ij} = \frac{\pi R_{ij}^4}{8M_{ij}l} \frac{2s_{ij}\sigma}{R_{ij}}, \quad (8)$$

where l is the length of the tube, σ is the coefficient of surface tension, $M_{ij} = \frac{(\mu_1 l_1 + \mu_2 l_2)_{ij}}{l}$ is the average viscosity of the fluid in the capillary τ_{ij} , μ_k is the coefficient of dynamic viscosity of the fluid F_k , and $(l_k)_{ij}$ is the length occupied by the fluid F_k in the capillary τ_{ij} ($k = 1, 2$). The multiplier s_{ij} takes into account the number and orientation of menisci in the capillary τ_{ij} , when calculating the total capillary pressure jump in the tube. The multiplier $s_{ij} = 0$ if the ends of the tube are filled with identical fluids, $s_{ij} = 1$ if the end of the tube at node i is filled with a wetting fluid, and the end at node j is filled with a nonwetting fluid, $s = -1$ otherwise.

Since $M_{ij} = M_{ji}$, and $s_{ij} = -s_{ji}$ we have

$$A_{ij} = A_{ji}, \quad (9)$$

$$B_{ij} = -B_{ji}. \quad (10)$$

The average fluid velocity in the capillary τ_{ij} is

$$v_{ij} = \frac{Q_{ij}}{\pi R_{ij}^2}. \quad (11)$$

The law of conservation of volume at the nodes for a closed system (in the absence of sources/sinks at the nodes) leads to a system of n linear equations for determining the pressures at the nodes:

$$\sum_j Q_{ij} = 0, \quad i = 1, 2, \dots, n, \quad (12)$$

where j are the indexes of the nodes connected to node v_i . For example, in Fig. 1, $i = 3$, and $j = (1, 2, 4, 5)$. Taking equation (6) into account, we have

$$\sum_j A_{ij}(P_i - P_j) = -\sum_j B_{ij}, \quad i = 1, 2, \dots, n. \quad (13)$$

In the problem of counter-current imbibition, we have a closed system, that is, no fluid can enter or leave the system. The determinant of the matrix of the system of linear equations is equal to zero (the summation of equations (13), due to (9) and (10) leads to the identity $0 = 0$). This case is solved by adding a constant to the elements of an arbitrary column k of the matrix of the linear equations, which enforces the additional condition $P_k = 0$.

The coordinates of the menisci, if present in the τ_{ij} tube, satisfy the equation

$$\frac{dx_{ij}}{dt} = v_{ij}. \quad (14)$$

Let us formulate the equations in dimensionless form by introducing the linear scale L_m , the pressure scale P_m and the dynamic viscosity scale μ_m , such that: $x = L_m \tilde{x}$, $R_{ij} = L_m \tilde{R}_{ij}$, $l_{ij} = L_m \tilde{l}_{ij}$, $t = t_m \tilde{t}$, $v_{ij} = v_m \tilde{v}_{ij}$, $P = P_m \tilde{P}$, $M_{ij} = \mu_m \tilde{M}_{ij}$. We define:

$$v_m \equiv \frac{L_m P_m}{\mu_m}, \quad t_m \equiv \frac{L_m}{v_m}. \quad (15)$$

The flow equations in dimensionless form are

$$\frac{d\tilde{x}_{ij}}{d\tilde{t}} = \tilde{v}_{ij}, \quad (16)$$

$$\tilde{v}_{ij} = \frac{\tilde{R}_{ij}^2}{8\tilde{M}_{ij}\tilde{l}_{ij}} \left(\Delta\tilde{P}_{ij} + \frac{1}{N} \frac{2s_{ij}}{\tilde{R}_{ij}} \right), \quad (17)$$

where N is the capillary number, which is a dimensionless parameter characterizing the relationship between the viscous and the capillary forces:

$$N = \frac{v_m \mu_m}{\sigma} = \frac{L_m P_m}{\sigma}. \quad (18)$$

Note that the capillary number N can be expressed in terms of the radius R_{ref} and the length l_{ref} of the tube, with a pressure difference at the ends of the capillary of scale P_m :

$$\tilde{v}_{ij} = \frac{\tilde{R}_{ij}^2}{8\tilde{M}_{ij}\tilde{l}_{ij}} \left(\Delta\tilde{P}_{ij} + \frac{\alpha}{N_c} \frac{2s_{ij}}{\tilde{R}_{ij}} \right), \quad (19)$$

$$N_c \equiv \frac{R_{\text{ref}}^2 P_m}{8l_{\text{ref}}\sigma}, \quad \alpha = \frac{N_c}{N} = \frac{R_{\text{ref}}^2}{8l_{\text{ref}}L_m}. \quad (20)$$

In the problem of capillary imbibition we choose the value $P_m = \frac{\sigma}{R_{\text{ref}}}$ as the pressure scale and $L_m = R_{\text{ref}}$ as the length scale, then $N = 1$ and equations (16) and (17) take dimensional form. The distribution of wetting and nonwetting fluids along the outgoing flows at each node is determined from the condition of minimum contact energy of the nonwetting fluid with the walls of the capillaries, the implementation of which in a network model is the novelty. A brief version of the algorithm:

1. Calculation of pressure at all nodes for the given configuration of menisci by solving the system of linear equations (13).
2. Determination of the time integration step Δt , such that $\Delta t = \frac{c_t l}{v_{\text{max}}}$, here v_{max} is the maximum velocity among all tubes, for all results in this article we have used $c_t = 0.1$.
3. Integration of equation (14) per time step Δt to calculate the displacements of menisci and the volumetric inflow and outflow in each node v_k .
4. Distribution of fluids in each node v_k according to the novel method, which is the wetting fluid is first distributed into the tubes according to the ascending order of their radii, and then the non-wetting fluid.
5. Recalculation of the position of the meniscus (merging of drops) when more than 2 menisci appear in a tube, such that the center of mass of each fluid in the tube remains the same.

In what follows all quantities are dimensionless, so the sign “~” is omitted.

3. Imbibition of an inclusion at a constant saturation

Using the developed algorithm, we solve the problem of imbibition of an inclusion inside a region with closed boundaries. Initially, the wetting fluid is located in the outer region and the nonwetting fluid is located in the inner region as shown in Fig. 2, *a*. During simulation, we calculate the saturation of the wetting fluid $S(t)$ in the inner region and the average capillary pressure P_c in the inner region were for various equilibrium values of S .

The computational domain consists of a grid of 30×30 tubes. The tubes in the outer region have radii of $R_{\text{outer}} = 6$. The inner region (inclusion) consists of thinner tubes with radii consisting of $R_{\text{inner}} = (2, 3, 4, 5)$. The volume of the inner region is approximately equal to the volume of the outer region, $V_{\text{inner}} \approx V_{\text{outer}}$, where $V_{\text{sys}} = V_{\text{inner}} + V_{\text{outer}}$.

Random small values are added to the initial radii of the tubes R_{ij}^0 that is $R_{ij} = R_{ij}^0 + \Delta R_{ij}$, thus preventing the case of two identical tubes being connected to a node, and thus ensuring that there

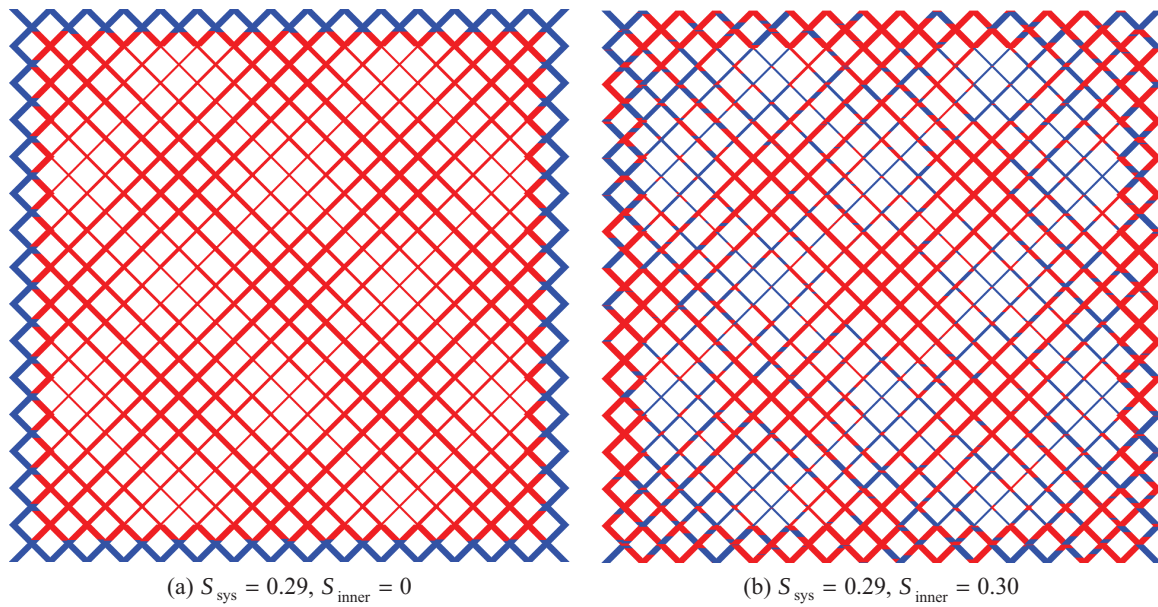


Figure 2. Flow visualization for counter-current imbibition, in 30×30 grid of tubes. S_{sys} is saturation of wetting fluid in the whole system, which remains constant, S_{inner} is saturation of wetting fluid in the inner region. All boundaries are closed. (a) Initial distribution, where the inner region of low-permeability is saturated with nonwetting, and outer region of high-permeability with wetting fluid. The wetting fluid invades the inner region solely due the capillary forces. (b) Final distribution, wetting fluid prefers to rest in the thinner capillaries

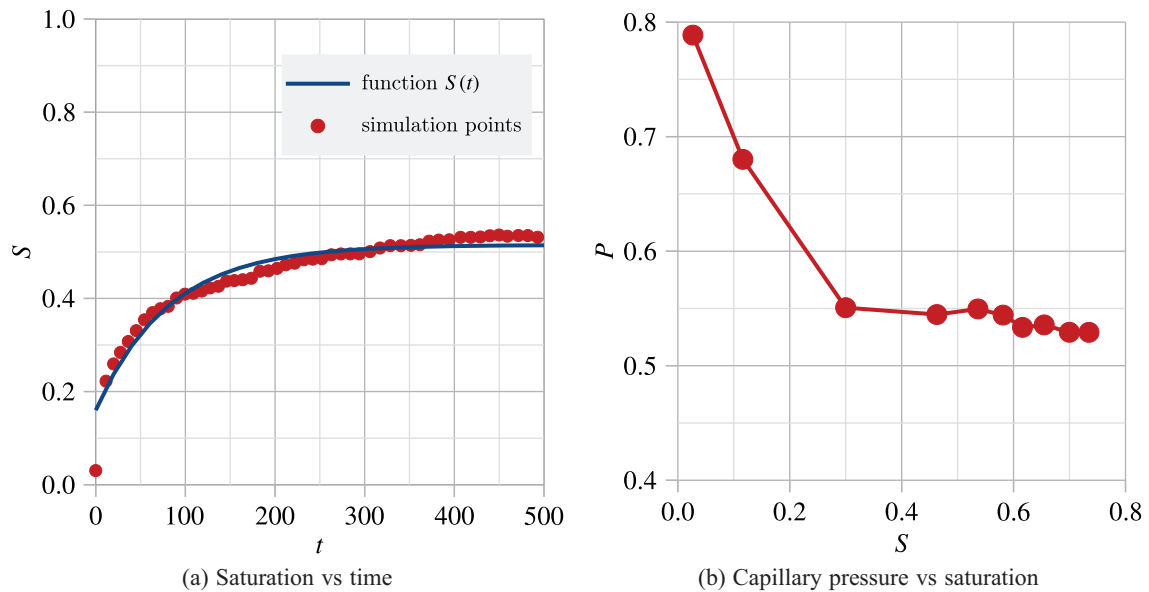


Figure 3. Results for counter-current imbibition. (a) Dependence of saturation S of the wetting fluid in the inner region with respect to dimensionless time t . (b) The dependence of average capillary pressure P (dimensionless) with respect to equilibrium saturation S

always exists a unique way of distributing fluids according to the novel method. In all results shown here, $\frac{\Delta R_{ij}}{R_{ij}^0} \approx \pm 10^{-3}$. The other constants used were: $\mu_1 = \mu_2 = 0.05$, $\sigma = 1$ and $l = 20$.

Series of calculations were carried out for different saturations of the wetting fluid in the whole system S_{sys} , where a system consists of the inner and the outer region. An example of the initial and

equilibrium configuration of fluids in a tube system is shown in Fig. 3. It can be seen that the wetting fluid preferentially penetrates the tubes of smaller radius.

Figure 3, *a* shows an example of the evolution of the saturation of the wetting fluid in the inner region over time for the case of maximum saturation 0.53. The calculated curve can be approximated quite well using the function

$$S(t) = C_1 + C_2(1 - e^{-C_3 t}), \quad (21)$$

where C_1 , C_2 and C_3 are fitting coefficients. In Fig. 3, *b*, we see that the average capillary pressure decreases with increase in equilibrium saturation, this is in agreement with the well-known theory and experimental results [Fatt, 1956].

4. Flow in a periodically inhomogeneous medium

Let us consider the process of displacement of a nonwetting fluid by a wetting fluid in a periodically inhomogeneous porous medium. Heterogeneity is modeled by varying the radii of the tubes. The radius of a tube is a function of the coordinate of its center (shown in Fig. 4, *a*):

$$R(x, y) = A(1 + B \cos(k_x x) \cos(k_y y)), \quad (22)$$

where $A = 4$, $B = 0.8$, $k_x = k_y = \frac{2\pi}{\lambda}$, $\lambda = 10\delta$, δ is the distance between two adjacent nodes, $\delta = \sqrt{2}l$, and l is the length of the tube.

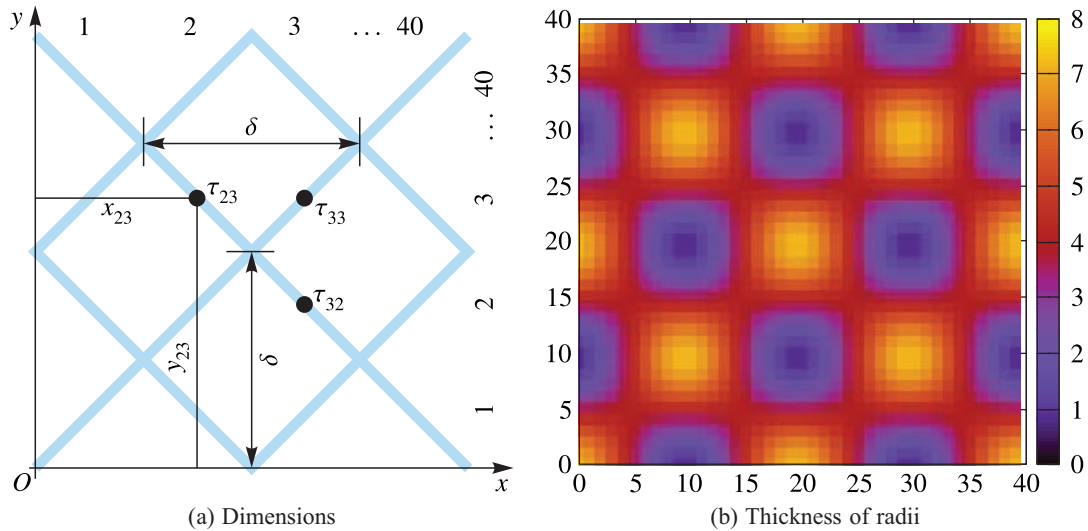


Figure 4. Radius distribution for filtration. (a) Simplified view of 40×40 tubes, with marked centers of 3 tubes τ_{32} , τ_{33} , and τ_{23} . The center of τ_{23} located at (x_{23}, y_{23}) . δ is the distance between any two adjacent nodes along an axis. (b) Periodical nonhomogeneity, heat map of radius distribution produced by equation (22), the numbers along the horizontal and vertical axes denote the k th row and column of the grid formed by tubes

The setup and boundary conditions are shown in Fig. 5. The top and bottom rows of nodes are closed boundaries, while the left and right column of nodes are open boundaries. The wetting fluid is injected at a constant flow rate Q from the left. All open nodes on the left boundary are maintained at the same input pressure $P_{in}(t)$, which are calculated at each computation step, in order to achieve $Q = \text{const}$ for various different distributions of menisci. Fluids are drained from the right open nodes, which is always maintained at a pressure $P_{out} = \text{const}$. We terminate the simulation when we have

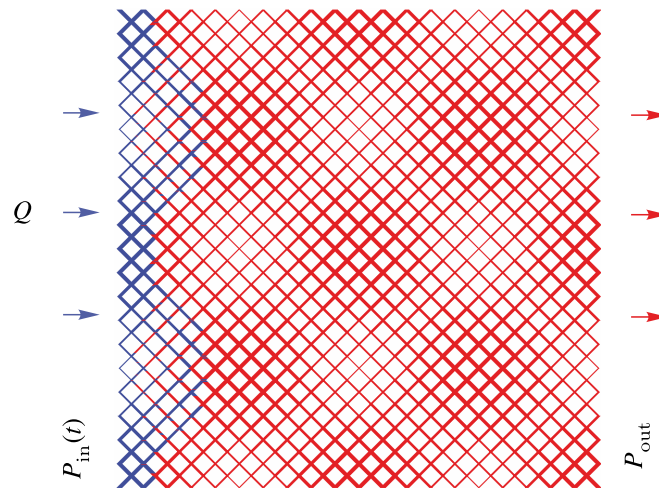


Figure 5. Boundary conditions for filtration. 40×40 tubes, $N = 1$, $t = 1000$, where N is the capillary number according to equation (18), and t is time in dimensionless form. Q is the volumetric injection rate, $P_{in}(t)$ is the input pressure, and P_{out} is the output pressure, all quantities are in dimensionless form

injected the wetting fluid of volume approximately equal to the total volume of the system V_{sys} . The physical time t_{max} for the simulation is

$$\int_0^{t_{max}} Q dt = V_{sys}; \quad (23)$$

since $Q = \text{const}$, we have

$$t_{max} = \frac{V_{sys}}{Q}, \quad (24)$$

where $V_{sys} = \sum_i \pi R_i^2 l$ for all tubes i .

For all results of filtration we have used: a grid of size 40×40 tubes; $\mu_1 = \mu_2 = 0.01$; $l = 100$; $P_{out} = 10.0$; $Q = 1000$. We calculate $V_{sys} = 9.7 \cdot 10^6 \approx 10^7$, and therefore from equation (24), $t_{max} \approx \frac{10^7}{10^3} = 10^4$.

We see flow visualization for the high capillary number $N = 1$ and the low capillary number for $N = 0.05$ in Fig. 6 and Fig. 7, respectively. In Fig. 6, it is clear that the fluid prefers to flow through the path of least resistance, which are the thicker tubes. In Fig. 6, *a*, the flow (front) is the least progressed along the horizontal axis of symmetry as the region there has thinner capillaries. In Fig. 6, *b*, we see formation of zones with nonwetting fluid located in the intersection of the thinner capillaries temporarily surrounded by the wetting fluid on all its sides. In Fig. 7, the wetting fluid prefers to flow through the thinner tubes with higher capillary forces. In Fig. 7, *a*, the flow through the thinner tubes has moved the furthest ahead, partially surrounding the zones of intersection of the thicker tubes. In Fig. 7, *b*, we see the formation of zones with the nonwetting fluid located in the intersection of the thicker capillaries temporarily surrounded by the wetting fluid on all its sides.

In Fig. 8 we see three positions of the saturation front at different times for $N = 1$. Saturation $S(x, t)$ was calculated from the volume fraction of the wetting fluid within a vertical strip of thickness $\frac{\delta}{2}$. In Fig. 9, we see a comparison of the positions of saturation fronts at the same time $t = 4000$ for different N . Oscillations in saturation graphs are associated with the heterogeneity of the medium. It can be seen that for lower capillary numbers the oscillations are stronger. This is due to the fact that the volume of tubes in the region with thin tubes is much less than the volume of tubes in the region with thicker tubes.

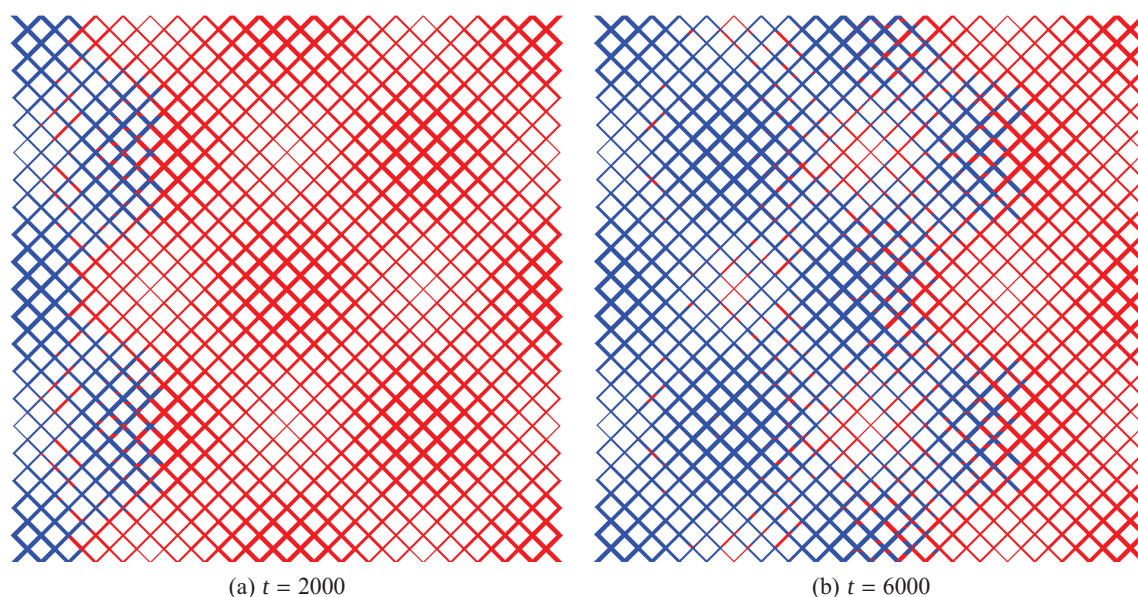


Figure 6. Flow visualization for filtration. 40×40 tubes, $N = 1$, high capillary number, corresponding to low capillary force, at various t , where N is the capillary number according to equation (18), and t is time in dimensionless form

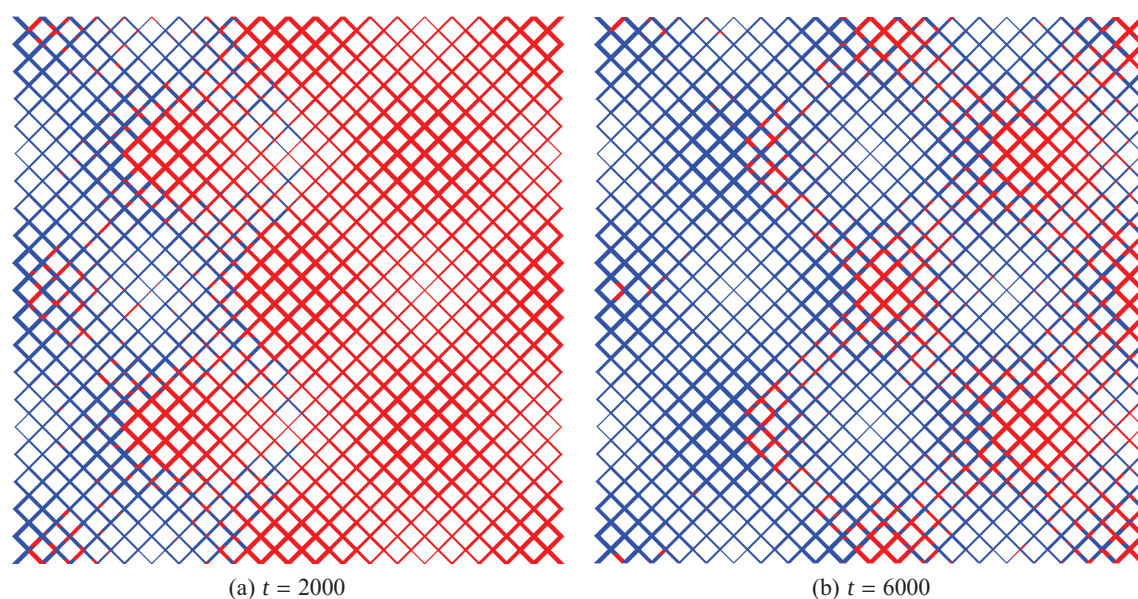


Figure 7. Visualization of flow for filtration in inhomogeneous porous medium. 40×40 tubes, $N = 0.05$, low capillary number, corresponding to high capillary force, at various t , where N is the capillary number according to equation (18), and t is time in dimensionless form

5. Conclusion

We developed a network model which uses a novel method of distributing phases at the nodes. We proposed two test problems: the problem of counter-current imbibition in an inclusion, and the problem of displacement in a periodically inhomogeneous porous media. We have observed the following properties: capillary imbibition, dependence of capillary pressure on saturation, the effect of capillary forces in two-phase displacement, which are analogous in real porous media. In the second

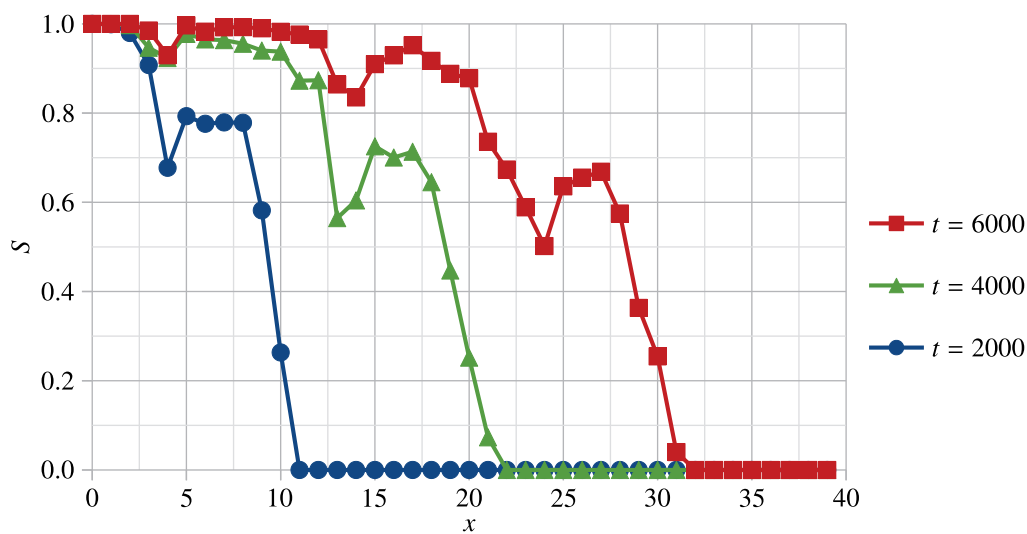


Figure 8. Results for filtration in inhomogeneous porous medium. 40×40 tubes, $N = 1$. S versus coordinate x for various t . Here, N is the capillary number according to equation (18), and t is time in dimensionless form. $S = S(x, t)$ is the saturation of the wetting fluid in the column of tubes located at x , where x is the number of tubes along the horizontal from the origin O , about O and x shown in detail in Fig. 4, a

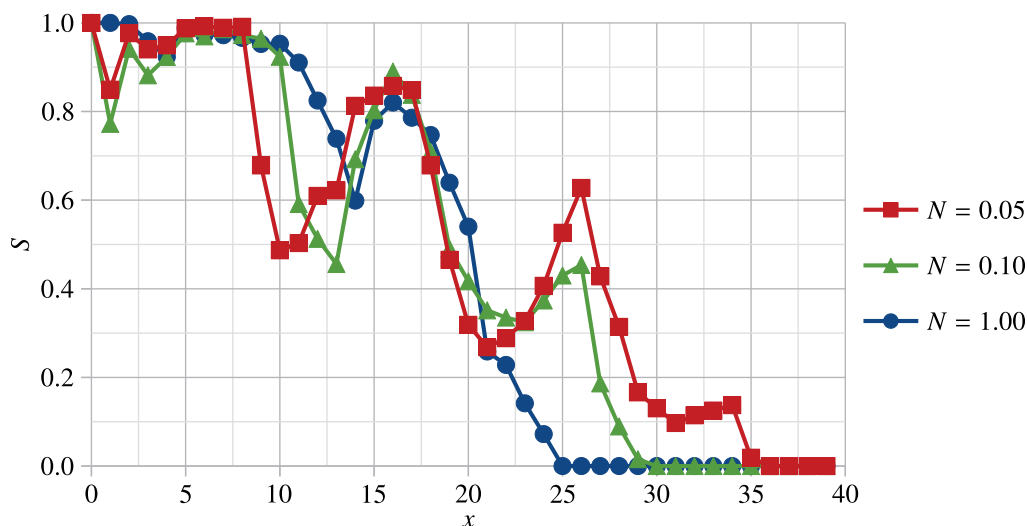


Figure 9. Results for filtration in inhomogeneous porous medium. 40×40 tubes, at $t = 4000$. S versus coordinate x for various N . Here, N is the capillary number according to equation (18), and t is time in dimensionless form. $S = S(x, t)$ is the saturation of the wetting fluid in the column of tubes located at x , where x is the number of tubes along the horizontal from the origin O , about O and x shown in detail in Fig. 4, a

problem about filtration in a periodically inhomogeneous porous medium, the result shows that, for higher value of capillary number, the wetting fluid prefers to invade through the thicker tubes, which is the path of the least resistance and in the case of lower, through thinner tubes. It is clear that at low capillary numbers the fluid predominantly moves through thin capillaries. At low capillary numbers the redistribution of fluids in the pore space occurs faster than at high capillary numbers. Thus, the flow with small capillary numbers is closer to the equilibrium case. Most importantly, the method of distributing fluids in a node is valid and can be extended to an arbitrary number of connections, which will be used in developing a network model for three dimensions. For the dependence of average capillary pressure vs saturation in the problem of counter-current imbibition, a qualitative agreement

with known experimental and theoretical results has been obtained. This will further allow the network model to be used to verify other homogenized models of capillary nonequilibrium.

6. Appendix

The source code used is located here: <https://github.com/kafiulshabbir/porus-fluid>.

References

- Aker E. et al.* A two-dimensional network simulator for two-phase flow in porous media // *Transport in porous media*. — 1998. — Vol. 32. — P. 163–186.
- Barenblatt G., Patzek T., Silin D.* The mathematical model of nonequilibrium effects in water–oil displacement // *SPE journal*. — 2003. — Vol. 8, No. 4. — P. 409–416.
- Barenblatt G., Zheltov I., Kochina I.* Basic concepts in the theory of seepage of homogeneous liquids in fissured rocks // *Journal of applied mathematics and mechanics*. Pergamon. — 1960. — Vol. 24, No. 5. — P. 1286–1303.
- Blunt M. et al.* Pore-scale imaging and modelling // *Advances in Water resources*. Elsevier. — 2013. — Vol. 51. — P. 197–216.
- Chen S., Doolen G.* Lattice Boltzmann method for fluid flows // *Annual review of fluid mechanics*. — 1998. — Vol. 30, No. 1. — P. 329–364.
- Coussy O.* Poromechanics. — John Wiley & Sons, 2004. — P. 315.
- Fatt I.* The network model of porous media. 3. Dynamic properties of networks with tube radius distribution // *Transactions of the American institute of mining and metallurgical engineers*. — 1956. — Vol. 207, No. 7. — P. 164–181.
- Hassanizadeh S.* Continuum description of thermodynamic processes in porous media: Fundamentals and applications // *Modeling Coupled Phenomena in Saturated Porous Materials*. — 2004. — P. 179–223.
- Hassanizadeh S., Gray W.* High velocity flow in porous media // *Transport in porous media*. Springer. — 1987. — Vol. 2. — P. 521–531.
- Kondaurov V.I.* A non-equilibrium model of a porous medium saturated with immiscible fluids // *Journal of Applied Mathematics and Mechanics*. Elsevier. — 2009. — Vol. 73, No. 1. — P. 88–102.
- Kondaurov V.I.* The thermodynamically consistent equations of a thermoelastic saturated porous medium // *Journal of applied mathematics and mechanics*. Elsevier. — 2007. — Vol. 71, No. 4. — P. 562–579.
- Konyukhov A., Pankratov L., Voloshin A.* Homogenized non-equilibrium models of two-phase flow in fractured porous media. — Moscow: Fizmatkniga, 2017. — P. 187.
- Konyukhov A., Pankratov L., Voloshin A.* The homogenized Kondaurov type non-equilibrium model of two-phase flow in multiscale non-homogeneous media // *Physica Scripta*. — 2019. — Vol. 94, No. 4.
- Labed N., Bennamoun L., Fohr J.* Experimental study of two-phase flow in porous media with measurement of relative permeability // *Fluid Dyn. Mater. Process. Citeseer*. — 2012. — Vol. 8, No. 4. — P. 423–436.
- Liu J., Lin L., Song R., Zhao J.* A pore scale modeling of fluid flow in porous medium based on Navier–Stokes equation // *Disaster Advances*. — 2013. — Vol. 6. — P. 5–11.
- Meakin P., Tartakovsky A.* Modeling and simulation of pore-scale multiphase fluid flow and reactive transport in fractured and porous media // *Reviews of Geophysics*. Wiley Online Library. — 2009. — Vol. 47, No. 3.

-
- Ramstad T., Berg C., Thompson K.* Pore-scale simulations of single- and two-phase flow in porous media: approaches and applications // *Transport in Porous Media*. Springer. — 2019. — Vol. 130. — P. 77–104.
- Shabbir K.* Simulation of two-phase flow in porous media using a two-dimensional network model // *Proceedings of the 65th all Russia Scientific Conference MIPT*. — Moscow: Fizmatkniga. — 2023. — Vol. 78. — P. 205–206.
- Su B., Sanchez C., Yang X.* Insights into hierarchically structured porous materials: from nanoscience to catalysis, separation, optics, energy, and life science // *Hierarchically Structured Porous Materials*. Wiley Online Library. — 2012. — P. 1–27.
- Whitaker S.* Flow in porous media. I: A theoretical derivation of Darcy's law // *Transport in porous media*. — 1986. — Vol. 1. — P. 3–25.

UDC: 004.9

Image classification based on deep learning with automatic relevance determination and structured Bayesian pruning

Cong Thang Pham^{1,a}, Minh Nhat Phan¹, Thi Thu Thao Tran²

¹The University of Danang — University of Science and Technology,
54 Nguyen Luong Bang st., Danang, 550000, Vietnam

²The University of Danang — University of Economics,
71 Ngu Hanh Son st., Danang, 550000, Vietnam

E-mail: ^a pcthang@dut.udn.vn (corresponding author)

Received 29.01.2024, after completion — 06.05.2024.

Accepted for publication 27.05.2024.

Deep learning's power stems from complex architectures; however, these can lead to overfitting, where models memorize training data and fail to generalize to unseen examples. This paper proposes a novel probabilistic approach to mitigate this issue. We introduce two key elements: Truncated Log-Uniform Prior and Truncated Log-Normal Variational Approximation, and Automatic Relevance Determination (ARD) with Bayesian Deep Neural Networks (BDNNs). Within the probabilistic framework, we employ a specially designed truncated log-uniform prior for noise. This prior acts as a regularizer, guiding the learning process towards simpler solutions and reducing overfitting. Additionally, a truncated log-normal variational approximation is used for efficient handling of the complex probability distributions inherent in deep learning models. ARD automatically identifies and removes irrelevant features or weights within a model. By integrating ARD with BDNNs, where weights have a probability distribution, we achieve a variational bound similar to the popular variational dropout technique. Dropout randomly drops neurons during training, encouraging the model not to rely heavily on any single feature. Our approach with ARD achieves similar benefits without the randomness of dropout, potentially leading to more stable training.

To evaluate our approach, we have tested the model on two datasets: the Canadian Institute For Advanced Research (CIFAR-10) for image classification and a dataset of Macroscopic Images of Wood, which is compiled from multiple macroscopic images of wood datasets. Our method is applied to established architectures like Visual Geometry Group (VGG) and Residual Network (ResNet). The results demonstrate significant improvements. The model reduced overfitting while maintaining, or even improving, the accuracy of the network's predictions on classification tasks. This validates the effectiveness of our approach in enhancing the performance and generalization capabilities of deep learning models.

Keywords: automatic relevance determination, Bayesian deep neural networks, truncated log-normal variational approximation, macroscopic image

Citation: *Computer Research and Modeling*, 2024, vol. 16, no. 4, pp. 927–938.

The authors express their gratitude to the anonymous reviewers for their insightful comments and suggestions. Pham Cong Thang, the corresponding author, would also like to thank his colleagues at the IT Faculty, DUT, Danang, Vietnam, for their helpful comments.

Introduction

In the field of image classification, Deep Neural Networks (DNNs) have made remarkable progress. However, when dealing with small datasets, neural networks tend to become overparameterized, leading to overfitting due to the abundance of weight parameters in the layers. To address this issue and mitigate overfitting during training, researchers have proposed various compression techniques to design lightweight models, including neural network pruning. Dropout regularization, initially suggested by Hinton et al. as a method to prevent overfitting [Hinton et al., 2012], involves randomly suppressing the activation levels of certain neurons during network training. This strategy enhances the model's feature extraction performance by retaining all neurons and recovering all training parameters. Zhou and Luo [Zhou, Luo, 2018] have proposed a strategy that considers the likelihood of node deletion based on the magnitude of the activation value. This approach enhances the model's feature extraction capabilities by selectively pruning nodes, thereby improving overall efficiency.

In addition to overfitting, compression and acceleration present significant challenges for neural networks, especially when their performance heavily depends on model parameters and computational cost. Further investigation into variational dropout reveals the possibility of reducing the size of the original network design and creating an extremely sparse model by examining individual dropout rates for each weight [Molchanov, Ashukha, Vetrov, 2017].

While general sparsity offers a means of neural network compression, most present-day deep neural network (DNN)-oriented software struggles to effectively handle sparse matrices, potentially maintaining the same assessment time for network evaluation. Simultaneously, enforcing organized sparsity in data tensors or convolutional filters can lead to acceleration. Structured sparsity techniques vary from the straightforward removal of redundant neurons or adoption of convolutional filters to more intricate patterns, such as those implemented in Perforated CNNs for eliminating redundant rows in intermediate dataframe matrices during convolutions [Figurnov et al., 2016]. Group-wise Brain Damage utilizes group-wise sparsity in convolutional filters [Lebedev, Lempitsky, 2016], and Structured Sparsity Learning offers a mechanism for selectively pruning entire convolutional filters or layers within residual networks [Wen et al., 2016]. These approaches facilitate the creation of parsimonious models while preserving accuracy, providing realistic acceleration with minimal adjustments to the existing model.

A meticulously adapted log-uniform prior, as proposed by Molchanov et al. [Molchanov, Ashukha, Vetrov, 2017; Kingma, Salimans, Welling, 2015], promotes sparsity while preserving model correctness and overcoming the drawbacks associated with improper priors [Hron, Matthews, Ghahramani, 2018]. Going beyond its conventional application, dropout can be viewed through the lens of variational inference and automatic relevance determination [Mackay, 1995; Neal, 2012], offering an alternative interpretation that mitigates its known deficiencies.

In this paper, these two methods are combined to create a model with substantial acceleration in convolutional neural networks, demonstrating an acceptable level of accuracy loss and a high level of group sparsity. The proposed model is designed based on VGG and ResNet architectures using CIFAR-10 and a Macroscopic Image of Wood dataset.

Related work

Pruning techniques in Bayesian neural network

In [Louizos, Ullrich, Welling, 2017], the pruning of neurons and all their incoming and outgoing weights is achieved through Bayesian modeling using sparsity-inducing priors on hidden units, instead of individual weights. In contrast, the author in [Neklyudov et al., 2017] primarily applies the Bayesian model to eliminate certain channels in each layer of the network for pruning purposes. The authors

in [Zhou et al., 2019] achieved more optimal pruning by accounting for interlayer dependencies during the pruning process and introduced a novel dropout-based redundancy measure to compute posterior hypothesis inter-layer relationships. Despite their differences, applying these techniques to the Bayesian model ultimately optimizes a weight importance metric that directly influences the pruning process.

Variational Dropout, initially proposed by Kingma et al. in 2015 [Kingma, Salimans, Welling, 2015], investigates the relationship between dropout and stochastic gradient variational Bayesian inference. Subsequent work by Molchanov et al. [Molchanov, Ashukha, Vetrov, 2017] further explores Variational Dropout, demonstrating its utility as a technique for model compression. This approach enables neural networks to utilize significantly fewer parameters while maintaining a surprisingly high level of accuracy.

Gaussian Dropout, as suggested in [Srivastava et al., 2014], represents a local reparameterization of stochastic gradient variational Bayesian (SGVB). The goal is to treat the dropout ratio as a parameter that can be learned during training, rather than as a fixed hyperparameter adjusted by the user.

In 2016, Gal and Ghahramani introduced the concept of Monte Carlo Dropout [Gal, Ghahramani, 2016], representing a deep Gaussian process in Bayesian approximation. A deep Gaussian process generates a probability distribution as its output, and the parameters of this distribution are estimated during testing using conventional dropout. This approach forms the basis for subsequent research [Gal, 2016; Lakshminarayanan, Pritzel, Blundell, 2017; Zhu, Laptev, 2017; Jungo et al., 2018], which focuses on characterizing the uncertainty of model outputs to address expressing uncertainty in deep learning without compromising test accuracy.

The idea that various neurons in a neural network should have varied dropout probabilities based on their perceived significance for specific characteristics was proposed by Li et al. through Evolutionary Dropout [Li, Gong, Yang, 2016]. Applied to both shallow and deep neural networks, Evolutionary Dropout determines the dropout ratio in shallow networks using the second-order statistics of input data features. In deep networks, the dropout ratio for each layer is determined in real-time using the output of that layer for each batch. Evolutionary Dropout significantly accelerates convergence while maintaining better accuracy results compared to ordinary dropout.

Wood identification

There are currently two primary techniques used for wood species identification: automatic and manual. Identifying the species of wood using the manual method is the conventional and most popular approach. This technique is based on the morphological (size, shape, color, and wood grain), mechanical (hardness, strength, and ductility), and chemical (chemical composition) characteristics of wood. Nevertheless, this method requires a high level of expertise and specialized wood knowledge from the practitioner [Silva, Bordalo, Pissarra, 2020]. In contrast, the automatic deep learning model for wood classification offers benefits such as reliability, accuracy, and lower requirements for practitioner experience [Silva, Bordalo, Pissarra, 2020].

Utilizing a diverse dataset containing 77 Congolese wood species, the authors in [Rosa et al., 2022] employed the multi-view random forest (MVRF) model to achieve accurate species identification. This innovative approach incorporated information from three distinct anatomical planes (cross-sectional, tangential, and radial), ensuring a comprehensive understanding of each wood sample [Rosa et al., 2022]. For wood species identification, integrating both cross-sectional and tangential features in the multi-view random forest model resulted in a substantial improvement in accuracy compared to using only cross-sectional features. While the inclusion of the radial plane also provided a slight performance gain, it was not as significant as the combined effect of cross-sectional and tangential features. Unlike traditional methods that rely solely on local phase quantization (LPQ) features, the MVRF model emerged as a clear winner, achieving significantly superior identification accuracy. This success can be attributed to the additional information harnessed by the three-plane

analysis, enriching the model's understanding of wood anatomy. Acknowledging the complexity of the wood species identification task and potential biases of k-folds, the authors opted for the leave-k-tree-out method for a more rigorous and reliable evaluation of their models, ensuring generalizability beyond the training data.

In differentiating between *Juniperus cedrus* and *J. phoenicea* var. *canariensis*, the authors of [Esteban et al., 2009] employed a feedforward multilayer perceptron (MLP) network, a type of artificial neural network, achieving a remarkable 92% accuracy. However, a limitation of this study is the lack of data diversity, as the performance of this model significantly decreases when the dataset is expanded [Silva et al., 2022]. The authors of [Lens et al., 2020] applied the ResNet101 model combined with an SVM classifier to identify 112 tree species, mainly in the tropics. This model focuses on microscopic analysis rather than macroscopic analysis and achieved an identification accuracy of 95.6% using cross-sections. The authors of [Filho et al., 2014] explored machine learning methods for wood species identification, proposing a two-level divide-and-conquer strategy for classification. Experiments on the Forest Species Database – Macroscopic dataset of 41 species yielded a result of 97.07%. The authors of [He et al., 2021] proposed a composite model from three convolutional neural network (CNN) models, using transfer learning to increase training speed. This method achieved an accuracy of 98.81% after training on a dataset of 41 wood species and 11,984 images. The results also highlighted the efficacy of using macroscopic images for high-performance identification, as opposed to microscopic images. However, both of these studies observed a decrease in accuracy when the dataset was expanded [Silva et al., 2022].

Methodology

Variational automatic relevance determination for neural network

At the core of our analysis are the weight matrices $W = (W^{(l)})_{l=1}^L$ present in L layers, examined within a data collection $\mathcal{D}$ consisting of paired input and output elements $(X, Y) = (x_n, y_n)_{n=1}^N$. Assuming the existence of a parametric model $p(\mathcal{D} | W) = \prod_{i=1}^N p(y_i | x_i, W)$, where $W \in \mathbb{R}^D$ establishes a relation between x and y governed by parameters W . Hyperparameters $\tau \in \mathbb{R}^H$ act as levers, adjusting the prior distribution $p(W | \tau)$ to influence the possible values of parameters W . In Bayesian neural networks (BNNs), addressing the intractability of the posterior $p(W | \mathcal{D}, \tau) = p(\mathcal{D} | W)p(W | \tau)/p(\mathcal{D} | \tau)$ involves employing a tractable parametric prior $p(W | \tau)$. We strategically optimize its hyperparameters τ to maximize the dataset's marginal likelihood (evidence), effectively approximating the posterior [Kharitonov, Molchanov, Vetrov, 2018]:

$$\tau^* = \arg \max_{\tau} p(\mathcal{D} | \tau) = \arg \max_{\tau} \int p(\mathcal{D} | W)p(W | \tau)dW. \quad (1)$$

Doubly Stochastic Variational Inference (DSVI) [Titsias, Lazaro-Gredilla, 2014] provides a method for approximating intractable posterior distributions in (1) by strategically designing an approximate posterior $q(W | \phi)$ and minimizing the KL-divergence $D_{KL}(q(W | \phi), \parallel, p(W | \tau))$. This process effectively translates to optimizing the Evidence Lower Bound (ELBO) by considering both parameters ϕ and hyperparameters τ , as follows:

$$\log p(\mathcal{D} | \tau) \geq \mathcal{L}(\phi, \tau) = \mathbb{E}_{q(W|\phi)}[\log p(\mathcal{D} | W)] - D_{KL}(q(W | \phi) \parallel p(W | \tau)) \rightarrow \max_{\phi, \tau}. \quad (2)$$

Incorporating an Automatic Relevance Determination (ARD) prior [Mackay, 1995; Neal, 2012] given by $p(W | \tau) = \prod_{i=1}^D \mathcal{N}(W_i | 0, \tau_i^{-1})$ and leveraging $q(W | \mu, \sigma) = \prod_{i=1}^D \mathcal{N}(W_i | \mu_i, \sigma_i^2)$, we can

analytically derive the optimal hyperparameter values as $\tau_i^* = (\mu_i^2 + \sigma_i^2)^{-1}$ [Titsias, Lazaro-Gredilla, 2014]. This leads to the simplified Evidence Lower Bound (ELBO) expression of (2) as follows [Titsias, Lazaro-Gredilla, 2014]:

$$\mathcal{L}_{ARD}(\mu, \sigma) = \sum_{i=1}^N \mathbb{E}_{q(W|\mu, \sigma)}[\log p(y_i | x_i, W)] - \frac{1}{2} \sum_{j=1}^D \log \left(1 + \frac{\mu_j^2}{\sigma_j^2} \right) = \mathcal{L}_D(\mu, \sigma) + \mathcal{R}_{ARD}(\mu, \sigma) \rightarrow \max_{\mu, \sigma}. \quad (3)$$

The local reparameterization trick [Kingma, Salimans, Welling, 2015] serves as a crucial variance reduction technique, facilitating efficient optimization of this estimation through stochastic gradient methods. Under the restricted variational approximation $q(W | \mu) = \prod_{i=1}^D \mathcal{N}(W_i | \mu_i, \alpha_i \mu_i^2)$, where $\alpha_i > 0$, the Automatic Relevance Determination (ARD) objective (3) simplifies significantly. The regularizer term, being constant, no longer impacts optimization. This results in a streamlined objective function that depends solely on the parameters μ . Mathematically, it can be expressed as

$$\mathcal{L}_{ARD}(\mu) = \mathcal{L}_D(\mu) = \sum_{i=1}^N \mathbb{E}_{q(W|\mu)}[\log p(y_i | x_i, W)] \rightarrow \max_{\mu}. \quad (4)$$

Connection with Log-Normal Multiplicative Noise Pruning

Log-Normal Multiplicative Noise Pruning is a technique that achieves organized sparsity within neural networks through a unique approach. This innovative mechanism fosters a structured pruning process, enabling the removal of entire neurons or convolutional channels for a leaner, more efficient network architecture. It introduces a distinct dropout-like layer, accompanied by a targeted regularization term, to strategically inject multiplicative noise θ into the outputs x with I features from preceding layers:

$$y_i = x_i \cdot \theta_i, \quad (5)$$

$$\theta_i \sim p_{noise}(\theta_i). \quad (6)$$

A fully-factorized improper log-uniform prior, denoted as $\text{LogU}_{\infty}(\cdot)$, is selected for the noise θ with the prior distribution $p(\theta)$, ensuring model sparsity and possessing an infinite domain. This distribution operates effectively for deep neural networks because of its sparsification properties [Molchanov, Ashukha, Vetrov, 2017]. With $\theta_i > 0$, $p(\theta) = \prod_{i=1}^I p(\theta_i)$ in (5) and (6), the log-uniform prior for sparsity is expressed as follows:

$$p(\theta_i) = \text{LogU}_{\infty}(\theta_i) \propto \frac{1}{\theta_i}.$$

In order to perform variational inference, an approximation family $q(\theta | \phi)$ needs to be determined for the posterior distribution $p(\theta | \mathcal{D}) \approx q(\theta | \phi)$. This variational distribution is chosen to be a fully-factorized log-normal distribution, with $\varphi_i = (\mu_i, \sigma_i^2)$:

$$q(\theta | \phi) = \prod_{i=1}^I q(\theta_i | \mu_i, \sigma_i) = \prod_{i=1}^I \text{LogN}(\theta_i | \varphi_i),$$

$$\theta_i \sim \text{LogN}(\theta_i | \varphi_i) \Leftrightarrow \log \theta_i \sim \mathcal{N}(\log \theta_i | \varphi_i).$$

While the log-normal posterior and log-uniform prior offer enticing advantages, their combination for variational lower bound maximization presents optimization challenges. The

log-uniform prior's improper nature leads to infinite KL-divergence between the log-normal distribution $\text{LogN}(\varphi)$ and a log-uniform distribution LogU_∞ for finite parameter φ values, rendering the optimization ill-posed. To resolve this problem, a proper probabilistic model is obtained with the prior and the posterior:

$$\begin{aligned} p(\theta_i) &= \text{LogU}_\infty(\theta_i) \Rightarrow \text{LogU}_{[a,b]}(\theta_i), \\ q(\theta_i) &= \text{LogN}(\theta_i | \varphi_i) \Rightarrow \text{LogN}_{[a,b]}(\theta_i | \varphi_i), \\ \text{LogP}_{[a,b]}(\theta_i) &\propto \text{LogP}_\infty(\theta_i) \cdot \mathbf{I}_{[a,b]}(\log \theta_i). \end{aligned}$$

Leveraging the defined notation, where $\mathcal{L}_{\text{ARD}}(\mu)$ (4) signifies the ARD model loss, q and p represent truncated distributions, and $\phi(\cdot)$ and $\Phi(\cdot)$ symbolize the standard normal's PDF and CDF, the final loss is computed as follows:

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_{\text{ARD}}(\mu) - \sum_{l=1}^L \text{KL}(q(\theta_l | \mu_l, \sigma_l) \parallel p(\theta_l)),$$

where

$$\begin{aligned} \text{KL}(q(\theta_l | \mu_l, \sigma_l) \parallel p(\theta_l)) &= \sum_{i=1}^I \text{KL}(q(\theta_{l,i} | \mu_{l,i}, \sigma_{l,i}) \parallel p(\theta_{l,i})), \\ \text{KL}(q(\theta_{l,i} | \mu_{l,i}, \sigma_{l,i}) \parallel p(\theta_{l,i})) &= \log \frac{b-a}{\sqrt{2\pi e \sigma_{l,i}^2}} - \log(\Phi(\beta_{l,i}) - \Phi(\alpha_{l,i})) - \frac{\alpha_{l,i}\phi(\alpha_{l,i}) - \beta_{l,i}\phi(\beta_{l,i})}{2(\Phi(\beta_{l,i}) - \Phi(\alpha_{l,i}))}, \\ \alpha_{l,i} &= \frac{a - \mu_{l,i}}{\sigma_{l,i}}, \quad \beta_{l,i} = \frac{b - \mu_{l,i}}{\sigma_{l,i}}. \end{aligned}$$

Experimental results

The performance of the proposed method is assessed on two datasets: the standard CIFAR-10 benchmark and a real-world dataset of macroscopic wood images.

Dataset

Four individual datasets were integrated to create the comprehensive dataset used in this study: the Tropical Forest Species¹, the Brazilian Flora Species², the Wood Species Dataset³, and the Forest Species Database⁴. This integration was aimed at broadening the diversity for classification. During data preparation, images from classes with identical names were merged. Additionally, naming errors introduced by collectors were addressed by verifying and correcting the accurate species names, leading to the consolidation of corresponding image collections. The final dataset comprises 16,346 images from 75 species.

The combined dataset and detailed statistical information about the data sources are presented in Table (1) and Fig. (1). The distribution of image counts for each wood type in the combined dataset is depicted in Fig. (2). As indicated in Table (1) and Fig. (2), each species is represented by an average of 218 images, with a range from 24 to 1332 images per species. The Tropical Forest Species source contributes over 65 % of the dataset's images, whereas the Wood Species Dataset accounts for only about 4 % of the total.

¹ <https://web.inf.ufpr.br/vri/databases/forest-species-database-macroscopic> (accessed 18-03-2023).

² <https://zenodo.org/record/2545611> (accessed 18-03-2023).

³ <https://data.mendeley.com/datasets/yzzcbyvgmh/3> (accessed 18-03-2023).

⁴ <https://data.mendeley.com/datasets/cc78ftcdf9/1> (accessed 18-03-2023).

Table 1. Statistical analysis of dataset

Dataset	Number of images	Percentage	Number of species	Average
Forest Species Database	2942	17.99 %	41	71.76
Wood Species Dataset	709	4.34 %	12	59.08
Tropical Forest Species	10,795	66.04 %	11	981.36
Brazillian	1901	11.63 %	46	41.32
Total	16,346	100 %	75	217.95

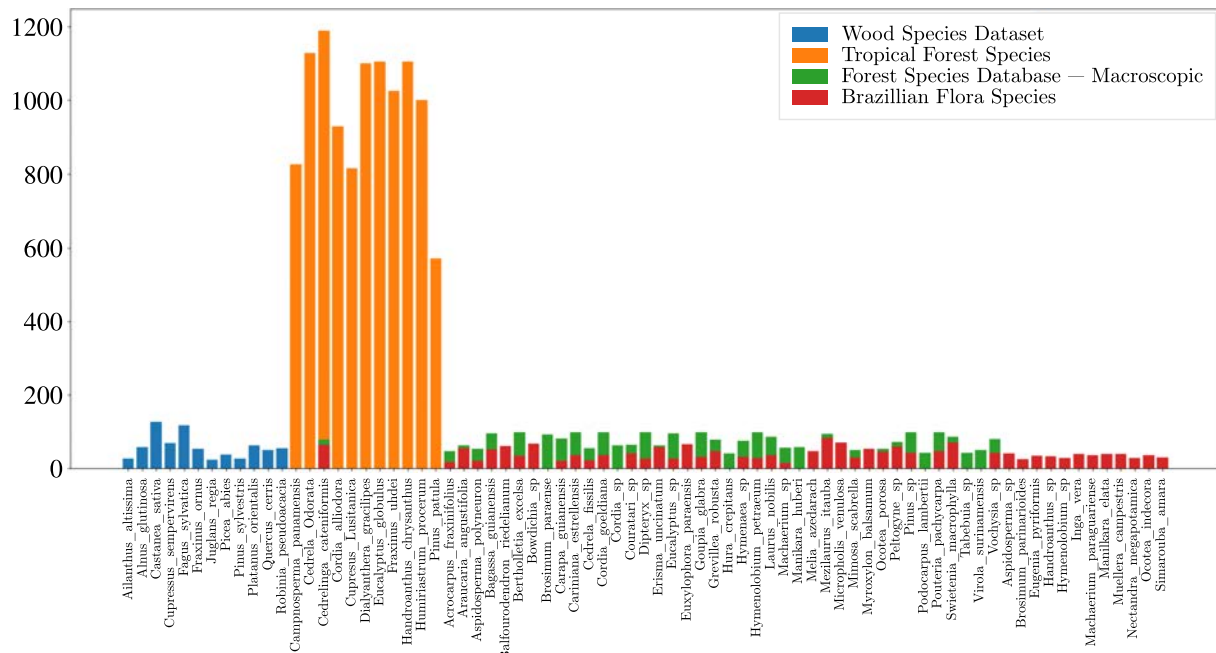


Figure 1. Number of images per species in each datasets

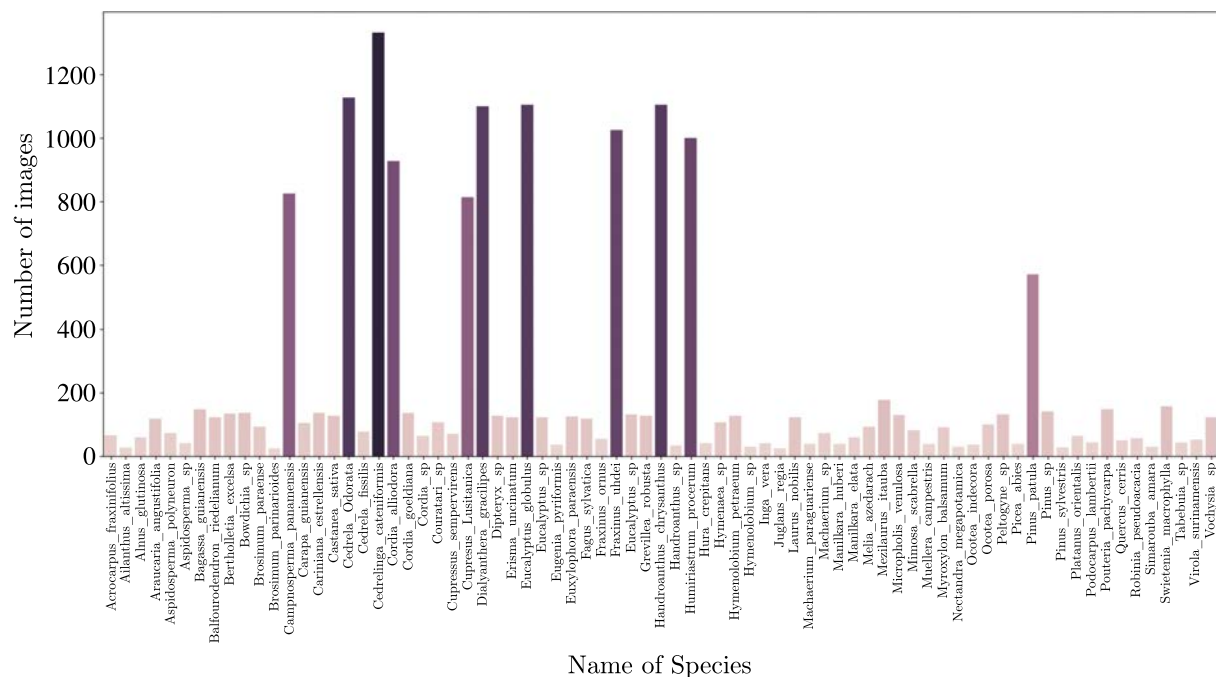


Figure 2. Number of images per species in the total dataset

Experiment setup

We built models based on the VGG-19 [Simonyan, Zisserman, 2014] and ResNet-18 [He et al., 2016] architectures and trained them on the CIFAR-10 and Macroscopic Image of Wood datasets for 300 epochs, with a batch size of 2048. We selected Adam as our optimizer, starting with a learning rate of 10^{-3} and employing Cosine Annealing for a smooth decay to 10^{-5} by the end of training. To prevent underfitting, we carefully scaled the regularizer terms by 0.05 and fine-tuned the truncation parameters a and b to ensure model regularization without amplifying input signals. We constrained θ to the range $[0, 1]$, setting the right truncation threshold b to 0, as empirical evidence shows minimal impact from the left truncation parameter a , which was set at $a = -20$ consistently throughout the experiments. The proposed method was implemented with the optimal parameter configuration described in the original study [Neklyudov et al., 2017] for comparative analysis. We divided the Macroscopic Image of Wood dataset into training, validation, and testing sets, allocating 60 %, 20 %, and 20 % of the data, respectively. The experiments were conducted using Python (v.3.9) and PyTorch (v.2.1) as the computational backbone, with the NVIDIA GeForce RTX 3090 graphics card, which features a 24 Gb memory capacity.

Evaluation

On CIFAR-10

Table 2. Evaluation on CIFAR-10 testing set

Model	Accuracy	Sparsity
Pruning ARD ResNet-18	96.352	0.931
Pruning ARD VGG-19	95.048	0.932

In Table 2, we report accuracy and sparsity for ResNet-18 and VGG-19 trained with Automatic Relevance Determination (ARD) combined with Structured Bayesian Pruning. Figure 3 depicts a comparison between the accuracy of the original model and the model trained with ARD combined with Structured Bayesian Pruning. It is evident that the proposed network model exhibits high sparsity with negligible degradation in classification accuracy. Specifically, ResNet-18 and VGG-19, trained with ARD combined with Structured Bayesian Pruning, achieve accuracies of 96.352 % and 95.048 %, respectively. Furthermore, the accuracy of the suggested models decreases by only 2–3 % compared to the original models. Both models, built with the new technique, exhibit more than 93 % sparsity. Higher sparsity helps networks reduce numbers of active connections by eliminating connections entirely, the model bypassed the need to explicitly multiply each input. This eliminates unnecessary computations, leading to improved efficiency. In Bayesian statistics, hierarchical priors are a way to introduce prior information not just about the model parameters, but also about the hyperparameters themselves. The approach also accommodates the application of hierarchical priors to hyperparameters, providing a mechanism for optimizing the sparsity-accuracy trade-off. Notably, the original model exhibits an inadequate level of generalization on the test set despite satisfactory performance on the training set. In contrast, the suggested model mitigates overfitting issues. Within the first 50 epochs, the proposed model demonstrates notable acceleration in achieving accurate predictions, transitioning to a slower approach and ultimately reaching optimal performance. The ARD model attains a training accuracy of over 80 % after just 30 epochs, outperforming other models that require a more extended training period to reach similar accuracy levels. Overall, these findings suggest that the ARD technique effectively improves the accuracy of deep learning models. ARD models appear less prone to overfitting than other models, achieving high accuracy on both training and test datasets.

The impressive complexity-learning capabilities of large networks are undermined by their vulnerability to overfitting and their unsuitability for devices lacking computational muscle. Pruning,

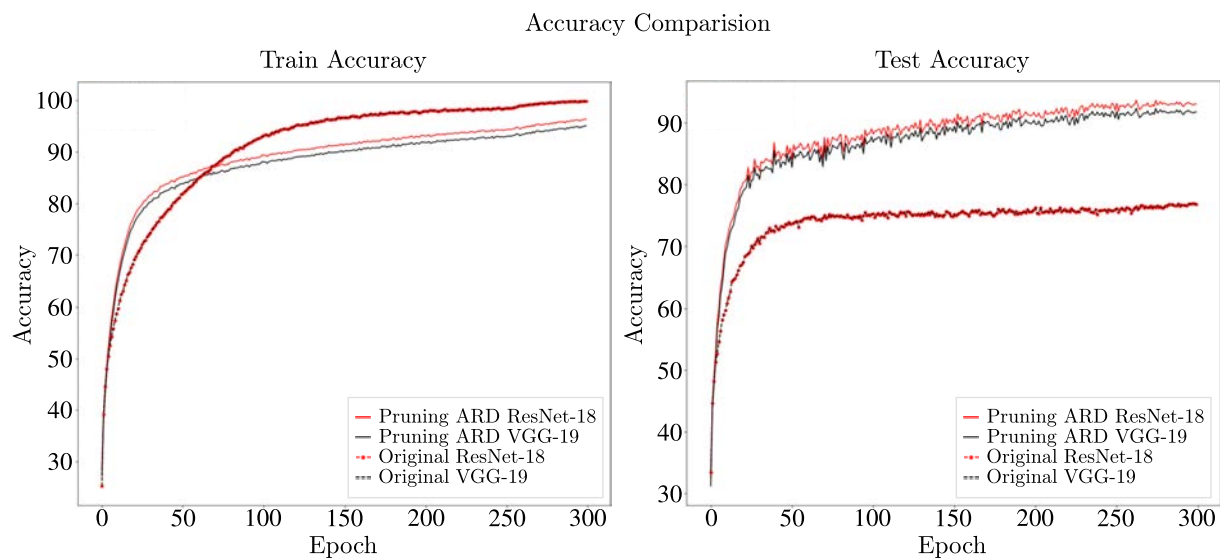


Figure 3. Training and Testing Accuracy after each epoch on CIFAR-10 dataset

a technique that optimizes network size with minimal impact on learning complex functions, serves as a bridge between powerful yet resource-intensive networks and efficient but limited models. Specifically addressing the issue of Binary Neural Network (BNN) complexity, our proposed pruning method takes a significant step forward by successfully eliminating a substantial portion of the network parameters. However, the current approach to structured pruning, though successful in shrinking the model, carries the risk of generating sparse structures that may negate potential computational benefits. To address this concern, our suggested method outperforms other studies [Mathew, Rowe, 2023; Beckers et al., 2023] in terms of accuracy and sparsity, offering better results. This method represents a promising advancement in overcoming the challenges associated with pruning BNNs and enhancing their efficiency.

On Macroscopic Image of Wood

Table 3. Evaluation on Macroscopic Image of Wood testset

Model	Accuracy	F1 Score	Precision	Recall	Sparsity
Pruning ARD ResNet-18	91.876	0.901	0.903	0.923	0.933
Original ResNet-18	91.572	0.913	0.907	0.919	0.226
Pruning ARD VGG-19	90.538	0.889	0.892	0.887	0.932
Original VGG-19	90.782	0.899	0.897	0.901	0.235

Table 3 and Fig. 4 present information on four metrics related to the training process of four models. These metrics encompass accuracy, F1 Score, Precision, and Recall. In order to assess model performance on imbalanced datasets, macro-averaging is relied upon for precision, recall, and F1-score. This technique is particularly effective because it considers the size of each class, ensuring a fair evaluation even when some classes have far fewer samples [Mortaz, 2020]. While accuracy might seem like a straightforward metric, it can be misleading for imbalanced data. A model could simply predict the majority class all the time and achieve high accuracy, yet completely miss the mark on the minority classes that are often more important. Accuracy is therefore employed for visualization purposes in Fig. 4. It serves to illustrate general trends, such as how the model's overall performance changes with increasing class imbalance in the training data. Additionally, accuracy's simplicity makes it an accessible way to convey the results. As observed, the suggested models achieve high accuracy

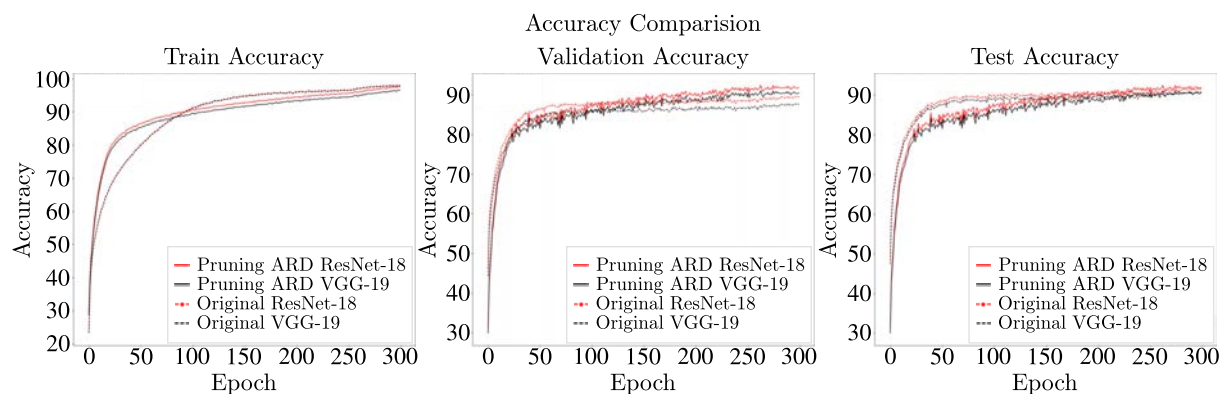


Figure 4. Training, Validation and Testing Accuracy after each epoch on Macroscopic Image of Wood dataset

without any reduction in these metrics when compared to the original model. The Automatic Relevance Determination (ARD) model demonstrates rapid convergence, surpassing a training accuracy of 80 % within 50 epochs. This swift learning pace highlights its efficient learning capabilities, outperforming other models. While the test accuracy gap narrows slightly compared to training, ARD maintains its advantage, showcasing superior generalizability. In comparison to the original model, the proposed method achieves a substantial 4 times compression in sparsity. This implies that the ARD model has four times as many zeros for the same number of parameters, leading to a fourfold boost in calculation speed due to efficient zero-computation. This significant improvement in efficiency surpasses the original model's performance.

Despite achieving high accuracy in wood classification based on macroscopic images, the proposed model falls short of previous studies [Esteban et al., 2009; Lens et al., 2020], due to data imbalance and data expansion. To enhance its performance and potentially surpass previous studies, future work will address data imbalance using techniques such as Focal Loss or Upsample. This approach holds promise for further improvements in accuracy and metrics, including F1 score, precision, and recall.

Conclusion

This work introduces a groundbreaking approach that combines variational Automatic Relevance Determination (ARD) approximation with fully factorized Gaussian variational posterior distributions, along with a dropout-like layer for noise introduction. Its iterative pruning mechanism stands out, and enables the model to achieve sparsity of over 90 % while maintaining as accuracy loss of less than 1–2 %. Demonstrably effective on VGG and ResNet, the flexibility of this technique extends to a wider realm of Convolutional Neural Network (CNN) architectures. Its impact is poised to reshape the future of CNN design, paving the way for architectures like MobileNet, ConvNet, and ConvNeXt to leverage its power. In this study, we construct the architecture of deep learning models and compare the effectiveness of this model to the original models that achieved high accuracy in wood classification based on macroscopic images. The ResNet-ARD model, designed to identify wood species by analyzing visual images, achieves an accuracy of 91.876 % on the test set, demonstrating the superiority of the model over its predecessors. The ARD technique enables the creation of models with fewer nonzero elements, reducing storage requirements, and potentially improving computational efficiency, all while maintaining the same level of accuracy.

References

- Beckers J., Erp B. V., Zhao Z., Kondrashov K., Vries B. D. Principled pruning of Bayesian neural networks through variational free energy minimization. // IEEE Open Journal of Signal Processing. — 2023. — Vol. 5. — P. 195–203.
- Esteban L. G., Fernandez F. G., et al. Artificial neural networks in wood identification: the case of two *Juniperus* species from the Canary Islands // IAWA Journal. — 2009. — Vol. 30. — P. 87–94.
- Figurnov M., Ibraimova A., Vetrov D., Kohli P. Perforated CNNs: acceleration through elimination of redundant convolutions // International Conference on Neural Information Processing Systems. — 2016. — P. 955–963.
- Filho P. L. P., Oliveira L. S., Nisgoski S., Britto A. S. Forest species recognition using macroscopic images // Machine Vision and Applications. — 2014. — Vol. 25. — P. 1019–1031.
- Gal Y. Uncertainty in deep learning. — University of Cambridge, 2016. — 174 p.
- Gal Y., Ghahramani Z. Dropout as a bayesian approximation: Representing model uncertainty in deep learning // International Conference on Machine Learning, ICML. — 2016. — Vol. 48. — P. 1050–1059.
- He T., Mu S., Zhou H., Hu J. Wood species identification based on an ensemble of deep convolution neural networks // Wood Research. — 2021. — Vol. 66. — P. 1–14.
- He K., Zhang X., Ren S., Sun J. Deep residual learning for image recognition // IEEE conference on computer vision and pattern Recognition (CVPR). — 2016. — P. 770–778.
- Hinton G., Srivastava N., Krizhevsky A., Sutskever I., Salakhutdinov R. Improving neural networks by preventing co-adaptation of feature detectors // CoRR. — 2012. — P. 1–18.
- Hron J., Matthews A., Ghahramani Z. Variational Bayesian dropout: pitfalls and fixes // International Conference on Machine Learning. — 2018. — P. 2019–2028.
- Jungo A. et al. Towards uncertainty-assisted brain tumor segmentation and survival prediction // International Conference on Medical Image Computing and Computer Assisted Intervention, MICCAI. BrainLes 2017. — 2018. — P. 474–485.
- Kharitonov V., Molchanov D., Vetrov D. Variational dropout via empirical Bayes // eprint arXiv:1811.00596. — 2018. — P. 1–5.
- Kingma D. P., Salimans T., Welling M. Variational dropout and the local reparameterization trick // International Conference on Neural Information Processing Systems. — 2015. — P. 2575–2583.
- Lakshminarayanan B., Pritzel A., Blundell C. Simple and scalable predictive uncertainty estimation using deep ensembles // International Conference on Neural Information Processing Systems. — 2017. — P. 6405–6416.
- Lebedev V., Lempitsky V. Fast convnets using group-wise brain damage // IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR). — 2016. — P. 2554–2564.
- Lens F., Liang C., Guo Y., et al. Computer-assisted timber identification based on features extracted from microscopic wood sections // IAWA Journal. — 2020. — Vol. 41. — P. 660–680.
- Li Z., Gong B., Yang T. Improved dropout for shallow and deep learning // International Conference on Neural Information Processing Systems. — 2016. — P. 2531–2539.
- Louizos C., Ullrich K., Welling M. Bayesian compression for deep learning // International Conference on Neural Information Processing Systems. — 2017. — P. 3290–3300.
- MacKay D. J. C. Probable networks and plausible predictions — a review of practical Bayesian methods for supervised neural networks // Network: Computation in Neural Systems. — 1995. — Vol. 6. — P. 469–505.
- Mathew S., Rowe D. B. Pruning a neural network using Bayesian inference // eprint arXiv:2308.02451. — 2023. — P. 1–26.

- Molchanov D., Ashukha A., Vetrov D.* Variational dropout sparsifies deep neural networks // International Conference on Machine Learning. — 2017. — Vol. 70. — P. 2498–2507.
- Mortaz E.* Imbalance accuracy metric for model selection in multi-class imbalance classification problems // Knowledge-Based Systems. — 2020. — Vol. 210. — P. 1–8.
- Neal R. M.* Bayesian learning for neural networks. — Lecture Notes in Computer Science. — 2012. — Vol. 118. — 204 p.
- Neklyudov K., Molchanov D., Ashukha A., Vetrov P.* Structured Bayesian pruning via log-normal multiplicative noise // International Conference on Neural Information Processing Systems. — 2017. — P. 6778–6787.
- Rosa da Silva N., Deklerck V., Baetens J. M., et al.* Improved wood species identification based on multi-view imagery of the three anatomical planes // Plant Methods. — 2022. — Vol. 18. — P. 1–17.
- Silva J. L., Bordalo R., Pissarra J.* Wood identification: an overview of current and past methods // ECR — Studies in Conservation & Restoration. — 2020. — Vol. 12. — P. 45–68.
- Silva J. L., Bordalo R., Pissarra J., Palacios P.* Computer vision-based wood identification: A review // Forests. — 2022. — Vol. 13. — P. 1–26.
- Simonyan K., Zisserman A.* Very deep convolutional networks for large-scale image recognition // International Conference on Learning Representations, ICLR. — 2015. — P. 1–14.
- Srivastava N., Hinton G., Krizhevsky A., Sutskever I., Salakhutdinov R.* Dropout: a simple way to prevent neural networks from overfitting // The Journal of Machine Learning Research. — 2014. — Vol. 15. — P. 1929–1958.
- Titsias M. K., Lazaro-Gredilla M.* Doubly stochastic variational Bayes for non-conjugate inference // International Conference on Machine Learning, ICML. — 2014. — Vol. 32. — P. 1971–1979.
- Wen W., Wu C., Wang Y., Chen Y., Li H.* Learning structured sparsity in deep neural networks // International Conference on Neural Information Processing Systems. — 2016. — P. 2082–2090.
- Zhou A., Luo K.* Sparse dropout regularization method for convolutional neural networks // Journal of Chinese Computer Systems. — 2018. — Vol. 39. — P. 1674–1679.
- Zhou Y., Zhang Y., Wang Y., Tian Q.* Accelerate CNN via Recursive Bayesian Pruning // IEEE International Conference on Computer Vision, ICCV. — 2019. — P. 3305–3314.
- Zhu L., Laptev N.* Deep and confident prediction for time series at uber // IEEE International Conference on Data Mining, ICDM. — 2017. — P. 103–110.

УДК: 519.257

Анализ прогностических свойств тремора земной поверхности с помощью разложения Хуанга

А. А. Любушин^а, Е. А. Родионов^б

Институт физики Земли им. О. Ю. Шмидта РАН,
Россия, 123242, г. Москва, Б. Грузинская ул., д. 10, стр. 1

E-mail: ^а lyubushin@yandex.ru, ^б evgeny_980@list.ru

Получено 23.05.2024, после доработки — 14.06.2024.

Принято к публикации 18.06.2024.

Предлагается метод анализа тремора земной поверхности, измеряемого средствами космической геодезии с целью выделения прогностических эффектов активизации сейсмичности. Метод иллюстрируется на примере совместного анализа совокупности синхронных временных рядов ежесуточных вертикальных смещений земной поверхности на Японских островах для интервала времени 2009–2023 гг. Анализ основан на разбиении исходных данных (1047 временных рядов) на блоки (кластеры станций) и последовательном применении метода главных компонент. Разбиение сети станций на кластеры производится методом *k*-средних из критерия максимума псевдо-*F*-статистики. Для Японии оптимальное число кластеров было выбрано равным 15. К временным рядам главных компонент от блоков станций применяется метод разложения Хуанга на последовательность независимых эмпирических мод колебаний (Empirical Mode Decomposition, EMD). Для обеспечения устойчивости оценок волновых форм EMD-разложения производилось усреднение 1000 независимых аддитивных реализаций белого шума ограниченной амплитуды. С помощью разложения Холецкого ковариационной матрицы волновых форм первых трех EMD-компонент в скользящем временном окне определены индикаторы аномального поведения тремора. Путем вычисления корреляционной функции между средними индикаторами аномального поведения и выделившейся сейсмической энергии в окрестности Японских островов установлено, что всплески меры аномального поведения тремора предшествуют выбросам сейсмической энергии. Целью статьи является прояснение распространенных гипотез о том, что движения земной коры, регистрируемые средствами космической геодезии, могут содержать прогностическую информацию. То, что смещения, регистрируемые геодезическими методами, реагируют на последствия землетрясений, широко известно и многократно демонстрировалось. Но выделение геодезических эффектов, предвещающих сейсмические события, является значительно более сложной задачей. В нашей статье мы предлагаем один из методов обнаружения прогностических эффектов в данных космической геодезии.

Ключевые слова: тремор земной поверхности, кластерный анализ, метод главных компонент, разложение Хуанга, мера аномального поведения временных рядов, корреляционная функция

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки России в рамках государственного задания № FMWU-2022-0018.

UDC: 519.257

Analysis of predictive properties of ground tremor using Huang decomposition

A. A. Lyubushin^a, E. A. Rodionov^b

Institute of Physics of the Earth of the Russian Academy of Sciences,
10/1 Bolshaya Gruzinskaya st., Moscow, 123242, Russia

E-mail: ^a lyubushin@yandex.ru, ^b evgeny_980@list.ru

*Received 23.05.2024, after completion — 14.06.2024.
Accepted for publication 18.06.2024.*

A method is proposed for analyzing the tremor of the earth's surface, measured by means of space geodesy, in order to highlight the prognostic effects of seismicity activation. The method is illustrated by the example of a joint analysis of a set of synchronous time series of daily vertical displacements of the earth's surface on the Japanese Islands for the time interval 2009–2023. The analysis is based on dividing the source data (1047 time series) into blocks (clusters of stations) and sequentially applying the principal component method. The station network is divided into clusters using the K-means method from the maximum pseudo-F-statistics criterion, and for Japan the optimal number of clusters was chosen to be 15. The Huang decomposition method into a sequence of independent empirical oscillation modes (EMD — Empirical Mode Decomposition) is applied to the time series of principal components from station blocks. To provide the stability of estimates of the waveforms of the EMD decomposition, averaging of 1000 independent additive realizations of white noise of limited amplitude was performed. Using the Cholesky decomposition of the covariance matrix of the waveforms of the first three EMD components in a sliding time window, indicators of abnormal tremor behavior were determined. By calculating the correlation function between the average indicators of anomalous behavior and the released seismic energy in the vicinity of the Japanese Islands, it was established that bursts in the measure of anomalous tremor behavior precede emissions of seismic energy. The purpose of the article is to clarify common hypotheses that movements of the earth's crust recorded by space geodesy may contain predictive information. That displacements recorded by geodetic methods respond to the effects of earthquakes is widely known and has been demonstrated many times. But isolating geodetic effects that predict seismic events is much more challenging. In our paper, we propose one method for detecting predictive effects in space geodesy data.

Keywords: tremor of the earth's surface, cluster analysis, principal component method, Huang decomposition, measure of anomalous behavior of time series, correlation function

Citation: *Computer Research and Modeling*, 2024, vol. 16, no. 4, pp. 939–958 (Russian).

The work was supported by Ministry of Education and Science of Russia, within the framework of state assignments No. FMWU-2022-0018.

1. Введение

Одной из задач анализа данных о движениях земной коры, получаемых с помощью средств космической геодезии, является выяснение вопроса о том, содержат ли они информацию, предвещающую сейсмические события. В начале 1990-х годов, когда данные GPS только появились и начали распространяться, было высказано много надежд на то, что они будут важным инструментом получения прогностической информации. Однако оказалось, что средства космической геодезии прекрасно выделяют постсейсмические эффекты, такие как смещения тектонических плит в результате сильных землетрясений. Что же касается предвестниковых эффектов, то для их выделения традиционные методы анализа временных рядов GPS оказались не очень приспособленными. Одной из причин для этого является то, что эти методы ориентированы на выделение так называемых трендов, то есть систематических низкочастотных компонент, которые легко поддаются интерпретации как проявления медленных тектонических движений. Высокочастотная составляющая этих временных рядов, которую можно назвать тремором земной поверхности, чаще всего интерпретируется как проявление шумов, возникающих из-за атмосферных и ионосферных флуктуаций. Наша точка зрения заключается в том, что, несмотря на наличие этих технологических шумов, именно в высокочастотной компоненте GPS-данных находится скрытая прогностическая информация. Игнорирование статистических свойств тремора, по нашему мнению, приводит к отсутствию прогресса в выделении прогностических эффектов в данных GPS.

Ранее в работах [Filatov, Lyubushin, 2017; Filatov, Lyubushin, 2019] анализ спектров когерентности временных рядов GPS использовался для выделения областей с повышенной сейсмической опасностью в Японии и Калифорнии. Когерентность дрожания земной поверхности анализировалась в работах [Lyubushin, 2018; Lyubushin, 2019]. В данной статье представлено дальнейшее развитие методов анализа тремора земной поверхности, предложенных в [Lyubushin, 2022; Lyubushin, 2023; Lyubushin, 2024]. Отличие данной статьи от предыдущих работ заключается в применении разложения Хуанга, которое хорошо приспособлено для учета эффектов нестационарности и нелинейности во временных рядах [Huang et al., 1998; Huang, Wu, 2008]. Этот метод успешно применяется для анализа геодезических временных рядов [Pan et al., 2015; Li, Guo, 2024], при обработке гидрологических [Huang et al., 2009], финансовых [Huang et al., 2003] и биологических [Li et al., 2011; Wei et al., 2018] данных.

Следует отметить, что тонкая структура временных рядов смещений земной поверхности, измеряемых с помощью GPS, является предметом исследований большого числа специалистов. Подход максимального правдоподобия для оценки параметров моделей временных рядов GPS использовался в [Roncagliolo et al., 2007; Wang, Li, Lu, 2017]. В работах [Bos et al., 2008; Wang et al., 2012] метод максимального правдоподобия использовался для оценки параметров формы спектров мощности и амплитуды шума в различных регионах мира. Структура шума и оценки ошибок рассмотрены в [Agnew, 1992; Amiri-Simkooei, Tiberius, Teunissen, 2007]. В работах [Caporali, 2003; Zhang et al., 1997] анализировались ошибки оценки скорости смещения в зависимости от формы спектра и интенсивности шумовой составляющей временного ряда. Параметрические модели временных рядов GPS для анализа тектонически активных территорий, включая анализ фазовых корреляций, использовались в [Li et al., 2000; Kermarrec, Schon, 2018].

Структура высокочастотного шума и низкочастотной сезонной составляющей временных рядов GPS в связи с задачей оценки скоростей смещения тектонических плит изучалась в работах [Blewitt, Lavallee, 2002; Bos, Bastos, Fernandes, 2010]. Сезонные эффекты в рядах сигналов GPS, связанные с гидрологической нагрузкой и тектоническими движениями земной коры, изучались в работах [Liu et al., 2020; Tesmer et al., 2011; Yan et al., 2019; Pan et al., 2015; Liu,

Dai, Liu, 2017; Fu et al., 2013; Chanard et al., 2014] с использованием различных методов, в том числе многомерного статистического подхода. Гипотезы о возникновении аномальных гармоник во временных рядах GPS рассмотрены в [Ray et al., 2008]. Методы многомерной статистики (главные компоненты, эмпирические ортогональные функции и оценка сингулярного спектра) в [Teferle et al., 2008; Chen et al., 2013] использовались для выявления общих пространственных и временных компонентов временных рядов GPS.

2. Данные

Данные о смещениях земной поверхности, измеренные с помощью GPS, взяты с сайта Геодезической лаборатории Невады [Blewitt, Hammond, Kreemer, 2018] по адресу (http://geodesy.unr.edu/gps_timeseries/tenv3/IGS14/).

Положения 1047 станций GPS для прямоугольной области $30^\circ \leq \text{Lat} \leq 46^\circ$, $128^\circ \leq \text{Lon} \leq 146^\circ$, которые имеют суточные временные ряды с начала 2009 года до конца 2023 года (15 лет), для которых общее количество пропусков менее 365 отсчетов и самый длинный разрыв менее 182 отсчетов, представлены на рис. 1, а. Исследуются вертикальные компоненты смещения земной поверхности. Пробелы во временном ряду GPS заполняются с использованием информации из левых и правых окрестностей разрыва той же длины, что и длина разрыва [Lyubushin, 2018].

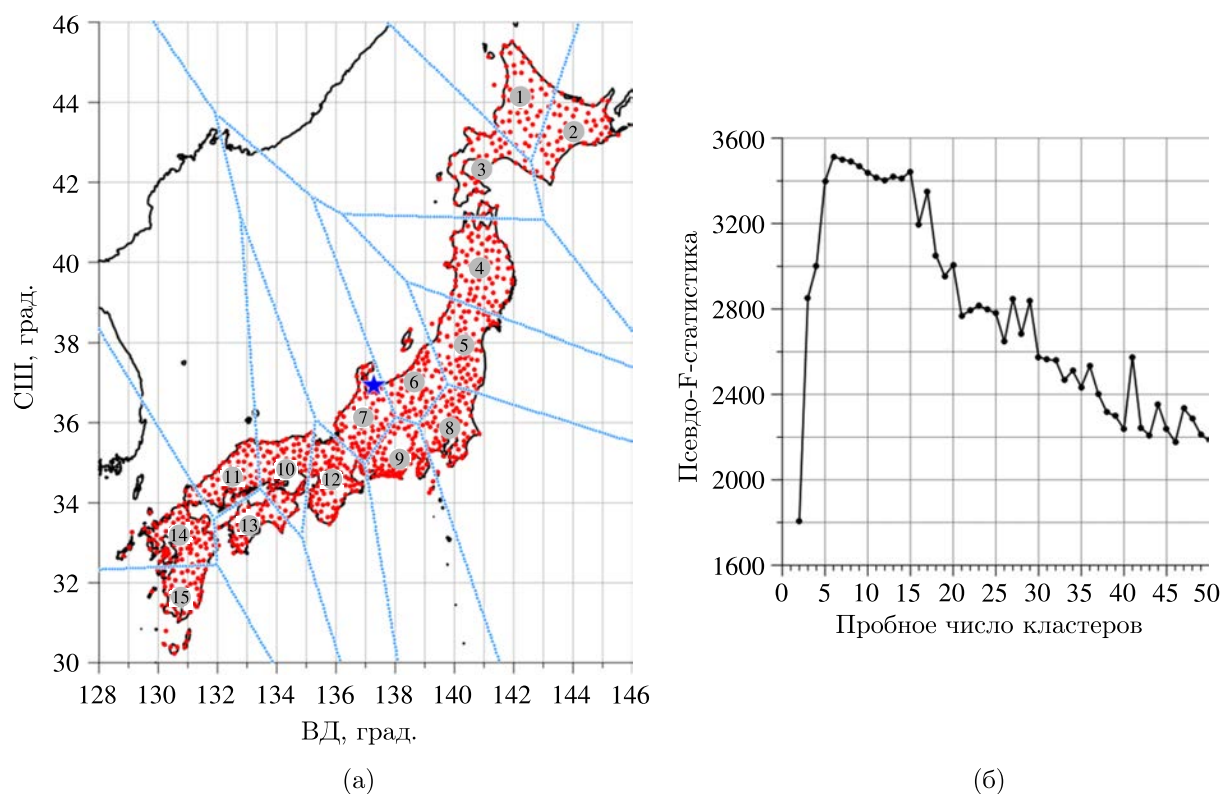


Рис. 1. а) Положения 1047 GPS-станций и их разделение на 15 кластеров. Пронумерованные кружки обозначают центры тяжести кластеров, синие линии — границы между ячейками Вороного. Синей звездой показано положение центра масс все центров кластеров. б) график псевдо-F-статистики, которая позволила выбрать 15 в качестве числа кластеров

Набор станций предварительно был разбит на кластеры. Для разделения сети станций на кластеры было выбрано 15 опорных точек (рис. 1). В качестве оптимального количества кластеров станций было выбрано число 15, которое разбивает их облако методом k-средних. Разобьем

набор векторов $\vec{\zeta}$ положения станций на заданное пробное количество q кластеров, используя популярный метод кластеризации k -средних [Duda, Hart, Stork, 2000]. Обозначим через C_r , $r = 1, \dots, q$, кластеры, пусть $\vec{z}_r = \sum_{\vec{\zeta} \in C_r} \frac{\vec{\zeta}}{n_r}$ — вектор центра масс кластера C_r , n_r — число векторов в кластере, $\sum_{r=1}^q n_r = N$. Вектор $\vec{\zeta} \in C_r$, если расстояние $|\vec{\zeta} - \vec{z}_r|$ минимально среди положений всех центров кластера. Метод k -средних минимизирует сумму квадратов расстояний:

$$G(\vec{z}_1, \dots, \vec{z}_q) = \sum_{r=1}^q \sum_{\vec{\zeta} \in C_r} |\vec{\zeta} - \vec{z}_r|^2 \rightarrow \min_{\vec{z}_1, \dots, \vec{z}_q}$$

относительно положения центров кластеров $\vec{z}_r$. Пусть $\Phi(q) = \min_{\vec{z}_1, \dots, \vec{z}_q} G(\vec{z}_1, \dots, \vec{z}_q)$. Мы использовали пробное количество кластеров в диапазоне $2 \leq q \leq 50$. Проблема выбора наилучшего числа q^* кластеров решалась с использованием критерия максимума псевдо-F-статистики [Vogel, Wong, 1979]:

$$PFS(q) = \frac{\sigma_1^2(q)}{\sigma_0^2(q)} \rightarrow \max_{2 \leq q \leq 50},$$

где

$$\sigma_0^2(q) = \frac{\Phi(q)}{N-q}, \quad \sigma_1^2(q) = \sum_{r=1}^q \frac{n_r}{N} \cdot |\vec{z}_r - \vec{z}_0|^2, \quad \vec{z}_0 = \frac{1}{N} \sum_1^N \vec{\zeta}.$$

График на рис. 1, б представляет значения псевдо-F-статистики в зависимости от пробного количества кластеров. Число 15 на графике псевдо-F-статистики является точкой излома зависимости от пробного числа кластеров и реализует один из наибольших локальных максимумов для числа кластеров от 2 до 50. На графике псевдо-F-статистики представляют собой два локальных максимума с близкими значениями числа кластеров 6 и 15. Из этих двух значений число 15 было выбрано как наибольшее с целью обеспечить наиболее детальное разбиение множества станций. На рис. 1, а показано разделение набора станций на 15 кластеров вместе с ячейками Вороного, которые указывают на принадлежность станций к тому или иному кластеру.

Кластеры станций упорядочены по возрастанию широты положения их центров тяжести. В таблице 1 для каждого кластера (первая строка) указано число станций в кластере (вторая строка).

Таблица 1. Количество станций N_{sta} в каждом кластере Clust#

Clust#	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
N_{sta}	57	56	54	83	69	61	78	77	91	76	57	95	48	88	57

3. Главные компоненты приращений в скользящем временном окне

Поскольку целью является исследование дрожания земной поверхности, то есть высокочастотной части смещений земной поверхности, анализ проводился для приращений временных рядов. Переход к приращениям снижает доминирующее влияние низких частот в суточном временном ряду GPS и обеспечивает стационарность фрагментов временного ряда в пределах 365-дневных временных окон, которые используются в дальнейшем.

Разбиение множества станций на 15 кластеров используется для последующего применения метода главных компонент [Айвазян и др., 1989; Jolliffe, 2002]. Для каждого кластера

станций рассчитывалась первая главная компонента временного ряда приращений вертикальных смещений земной поверхности в скользящем временном окне адаптации длиной 365 дней.

Пусть имеется p -мерное облако однотипных N -мерных сигналов $\{y_j(k)\}$, $k = 1, \dots, N$, $j = 1, \dots, p$. Выберем размер скользящего окна w и отцентрируем сигналы,

$$x_j(k) = y_j(k) - \overline{y_j(k)}, \quad j = 1, \dots, p, \quad k = w, \dots, N, \quad (1)$$

где

$$\overline{y_j(k)} = \frac{1}{w} \sum_{i=1}^w y_j(k - w + i), \quad k = w, \dots, N. \quad (2)$$

Следующим шагом является вычисление выборочной оценки ковариационной $p \times p$ -мерной матрицы в скользящем окне:

$$r_{XX}^{(m,n)} = \frac{1}{w} \sum_{i=1}^w x_m(i - w + k) x_n(i - w + k), \quad k, j = 1, \dots, p, \quad k = w, \dots, N. \quad (3)$$

Пусть $\phi^{(s)} = (\phi_1^{(s)}, \dots, \phi_p^{(s)})^T$ — собственный вектор этой матрицы, отвечающий максимальному собственному значению. Положим

$$\xi_s(k) = \sum_{j=1}^p (\phi_j^{(k)})^2 x_j(k), \quad k = w, \dots, N. \quad (4)$$

С понятными изменениями формулы (1)–(4) обобщаются на случай $k = 1, \dots, w - 1$.

Определим взвешенное среднее в скользящем временном окне длиной w по формуле

$$\xi(k) = \begin{cases} \xi_{w-1}(k), & k < w, \\ \xi_k(k), & k \geq w. \end{cases} \quad (5)$$

Таким образом, формулы (1)–(5) определяют значения взвешенных средних приращений вертикальных временных рядов смещений земной поверхности. В качестве весов берутся квадраты значений собственного вектора ковариационной матрицы в скользящем временном окне, соответствующего наибольшему собственному числу. Сумма этих весов равна единице.

В рамках каждого из 15 кластеров было осуществлен переход к взвешенному среднему методом, описанным выше, длина скользящего временного окна принималась равной 365 отсчетам, т. е. 1 году. При этом, в целях устранения влияния больших выбросов, до вычисления взвешенного среднего была произведена так называемая процедура винзоризации [Huber, 1981], которая заключается в устранении выбросов, выпадающих за уровень $\mu \pm 4\sigma$, путем срезки значений временного ряда в скользящем временном окне (μ и σ — выборочные оценки математического ожидания и стандартного отклонения для текущего временного окна). Процедура повторяется итеративно до тех пор, пока значения μ и σ не перестанут меняться.

На рис. 2 представлены графики первых главных компонент приращений (в виде взвешенных средних) вертикальных смещений земной поверхности в каждом из выделенных 15 кластеров.

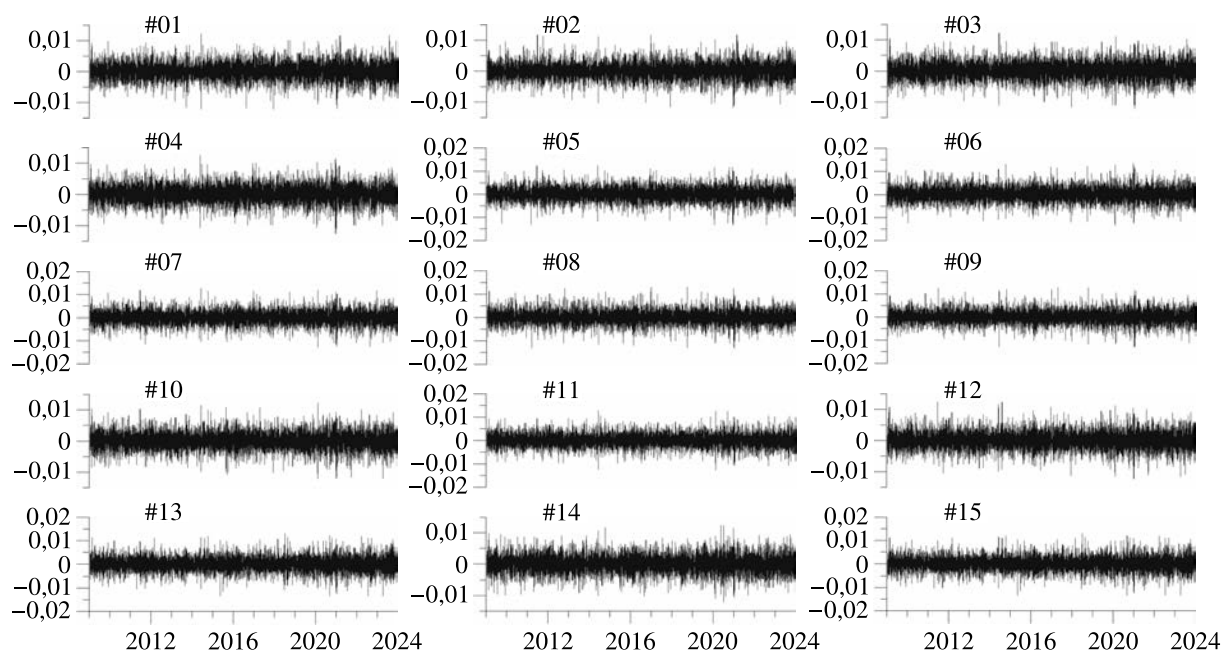


Рис. 2. Графики взвешенных средних вертикальных смещений земной поверхности в каждом из выделенных 15 кластеров в скользящем временном окне длиной 365 суток. По осям Y отложены приращения смещений в мм

4. Эмпирическая модовая декомпозиция

Пусть $x(k)$ — анализируемый дискретный сигнал. Эмпирическая модовая декомпозиция (EMD) [Huang et al., 1998; Huang, Wu, 2008; Ястребов, 2016; Давыдов, Давыдов, 2010; Миронов и др., 2017; Мурзагулов, Замятин, Романович, 2021; Павлов, Филатова, 2011] представляет собой разложение сигнала на эмпирические моды колебаний:

$$x(k) = \sum_{j=1}^n h_j(k) + r_n(k), \quad (6)$$

где $h_j(k)$ — j -я эмпирическая мода, $r_n(t)$ — остаток, n — количество эмпирических мод.

Алгоритм разложения на последовательность эмпирических мод является итерационным для каждого уровня j . Обозначим через m , $m = 0, 1, \dots, M_j$, индекс итераций, где M_j — максимальное число итераций для уровня j . Итерации описываются формулой

$$h_j^{(m+1)}(k) = h_j^{(m)}(k) - z_j^{(m)}(k). \quad (7)$$

Здесь $z_j^{(m)}(k) = \frac{p_j^{(m)}(k) + q_j^{(m)}(k)}{2}$, где $p_j^{(m)}(k)$ и $q_j^{(m)}(k)$ — верхняя и нижняя огибающие для сигнала $h_j^{(m)}(k)$, которые строятся с помощью сплайновой интерполяции (обычно сплайном 3-го порядка) по всем локальным максимумам и минимумам сигнала $h_j^{(m)}(k)$.

Итерации (7) инициализируются нулевым шагом для первого уровня ($j = 1$) разложения $h_1^{(0)}(k) = x(k)$. Далее находятся верхняя и нижняя огибающие $p_1^{(0)}(k)$ и $q_1^{(0)}(k)$, вычисляется средняя линия $z_1^{(0)}(k)$ и находится $h_1^{(1)}(k)$ по формуле (7). Для $h_1^{(1)}(k)$ определяются верхняя и нижняя огибающие $p_1^{(1)}(k)$ и $q_1^{(1)}(k)$ и средняя линия $z_1^{(1)}(k)$, находится $h_1^{(2)}(k)$ и так далее, до последнего индекса итераций M_1 , после которой считается, что первая эмпирическая мода $h_1(k)$ найдена.

Условие остановки итераций обычно выбирается в форме выполнения неравенства:

$$\frac{\sum_k \left(h_j^{(m+1)}(k) - h_j^{(m)}(k) \right)^2}{\sum_k \left(h_j^{(m)}(k) \right)^2} \leq \delta,$$

где δ — какое-нибудь малое число, например 0,01. После того как найдена мода $h_j(k)$, запускается итерационный процесс определения эмпирической моды $h_{j+1}(k)$ следующего уровня. Этот процесс инициализируется формулой для начального индекса итераций $m = 0$:

$$h_{j+1}^{(0)}(k) = x(k) - h_j(k). \quad (8)$$

Согласно формуле (8) из исходного сигнала вычитается высокочастотная часть и новый более низкочастотный сигнал рассматривается как новый сигнал для последующего разложения. Построение эмпирических мод колебаний продолжается до тех пор, пока число локальных экстремумов не станет слишком маленьким для того, чтобы по ним можно было построить огибающие. По мере увеличения номера уровня эмпирической моды j сигналы $h_j(k)$ становятся все более низкочастотными и стремятся к неизменяемой форме. Последовательность $h_1(k), h_2(k), \dots, h_n(k)$ построена таким образом, что ее сумма дает приближение к исходному сигналу $x(k)$, который может быть представлен в виде (6) [Huang et al., 1998; Huang, Wu, 2008]. Эмпирические моды являются ортогональными друг другу, составляя, таким образом, некий эмпирический базис разложения исходного сигнала.

При практической реализации метода возникают технические сложности из-за краевых эффектов, так как продолжение огибающих за пределы первых и последних точек локальных экстремумов является неоднозначным. Для преодоления этой трудности существуют несколько подходов, в частности зеркальное продолжение анализируемой выборки назад и вперед на достаточно длинный промежуток времени. Именно он использовался в данной работе.

5. Ансамблевая эмпирическая модовая декомпозиция

Одним из ключевых недостатков метода EMD является проблема смешивания мод, которая возникает, когда одна эмпирическая мода включает сигналы различных масштабов или же когда сигналы одного масштаба распределены по разным эмпирическим модам. Например, если в сигнале наблюдается перемежаемость, то есть на фоне плавного сигнала возникают кратковременные участки более высокочастотного поведения, то при EMD-разложении происходит смешивание мод поведения с разными частотами, так как сравнительно редкие точки локальных экстремумов плавного поведения перемежаются значительно более частыми точками локальных экстремумов высокочастотной компоненты.

Для борьбы с этим эффектом в работе [Huang, Wu, 2008] был предложен метод ансамблевой эмпирической модовой декомпозиции (EEMD). Он представляет собой регуляризацию метода EMD, в которой к исходным данным добавляется белый шум конечной амплитуды. Это позволяет определить истинные эмпирические моды как среднее значение по ансамблю испытаний, каждое из которых представляет собой сумму сигнала и белого шума.

Алгоритм EEMD включает следующие шаги:

- 1) добавление реализации белого шума к исходным данным,
- 2) разложение данных с добавлением белого шума в эмпирические моды,
- 3) повторение шагов 1 и 2 достаточно большое количество раз с разными реализациями белого шума,
- 4) получение среднего значения по ансамблю для соответствующих эмпирических мод.

Таким образом, имитируются многочисленные «искусственные» наблюдения:

$$x^{(i)}(k) = x(k) + \varepsilon_i(k),$$

где $\varepsilon_i(k)$ — i -я реализация белого шума.

Истинная компонента, согласно определению EEMD, для последовательности всех уровней эмпирических мод вычисляется как среднее значение разложений зашумленных мод. Важно отметить, что EEMD в значительной степени устраняет указанную проблему смешивания [Huang, Wu, 2008]. Добавление независимых белых шумов к выборке обладает регуляризующим эффектом, поскольку упрощает построение огибающих (локальных экстремумов после добавления малого белого шума сразу становится много). Операция усреднения по достаточно большому числу независимых реализаций белого шума позволяет избавиться от влияния шумовой компоненты и выделить истинные внутренние моды колебаний.

Для каждого из полученных 15 временных рядов были вычислены EEMD-волновые формы. EEMD-волновые формы получены путем усреднения 1000 разложений исходных сигналов, к которым добавлены независимые гауссовские белые шумы со стандартным отклонением 0,1 от стандартного отклонения взвешенного среднего от каждого кластера.

На рис. 3 приведены графики EEMD-волновых форм для первых 6 уровней разложения для трех из 15 кластеров.

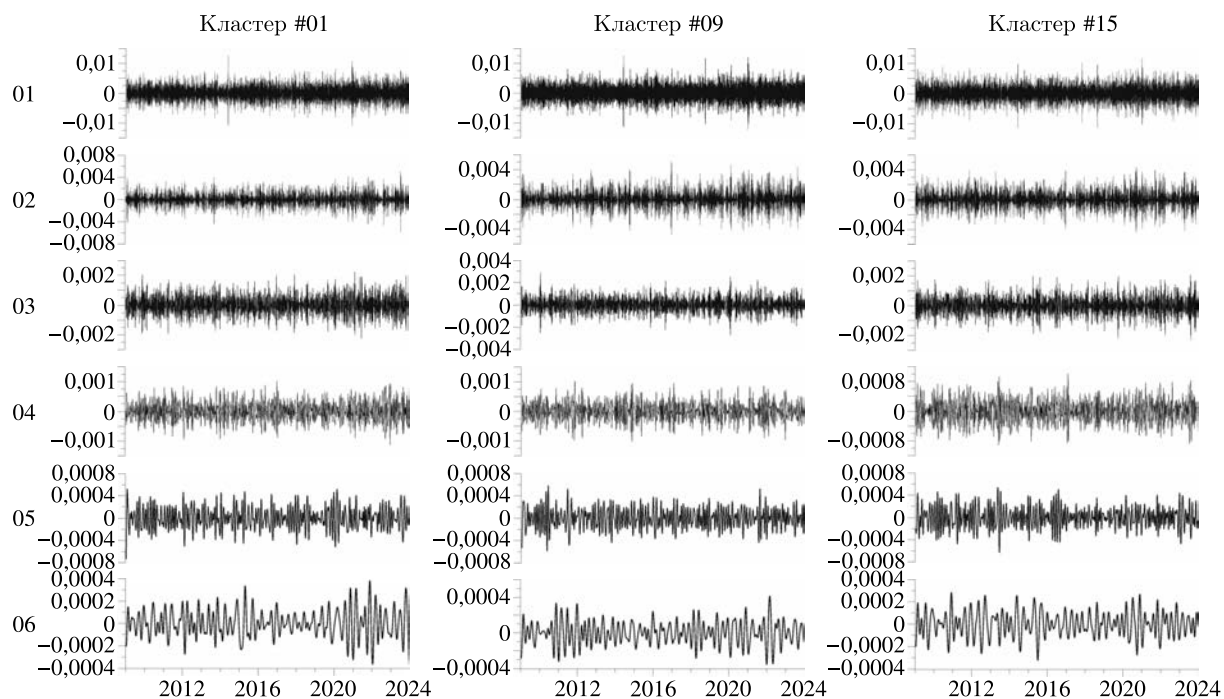


Рис. 3. Графики волновых форм EEMD для первых 6 уровней разложения для 3 кластеров (номера 1, 9 и 15). Номера уровней разложения указаны слева

Усредним волновые формы EEMD по всем 15 кластерам. В результате получим графики, изображенные на рис. 4.

6. Преобразование Гильберта

Изложенный выше метод разложения временных рядов в литературе известен как метод Гильберта – Хуанга. Хотя собственно преобразование Гильберта в данной статье не используется,

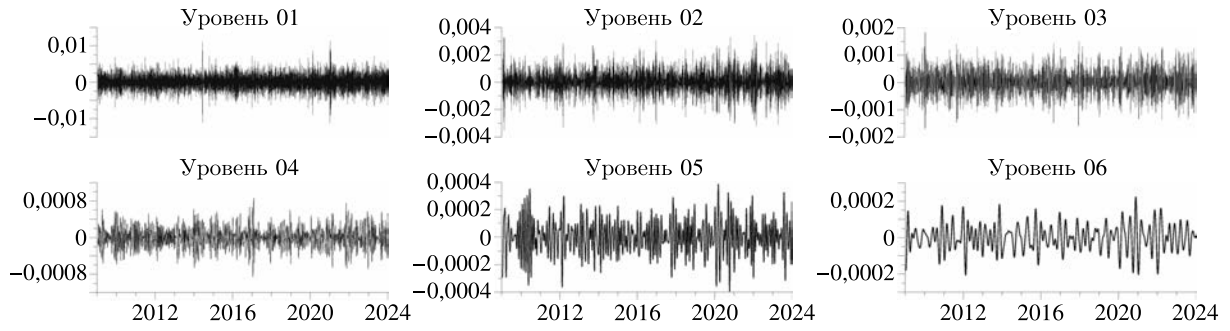


Рис. 4. Графики средних волновых форм EEMD для первых 6 уровней разложения

но для полноты изложения метода и во избежание недоумения у читателя мы приведем основные формулы и идеи применения преобразования Гильберта к полученным EEMD временным рядам разложения Хуанга исходных данных.

Преобразование Гильберта [Bendat, Piersol, 2010] $H_X(t)$ сигнала $X(t)$ определяется по формуле

$$H_X(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{X(u)}{\pi(t-u)} du = X(t) * \left(\frac{1}{\pi t} \right),$$

где $f(t) * g(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(u) \cdot g(t-u) du$ — свертка двух функций. Если $\tilde{f}(\omega)$ и $\tilde{g}(\omega)$ — преобразования Фурье свертываемых функций, $\tilde{f}(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(t) \cdot e^{-i\omega t} dt$, то, как известно, преобразование Фурье свертки равно произведению преобразований Фурье свертываемых функций. Преобразование Фурье от $\frac{1}{\pi t}$ равно

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-i\omega t}}{\pi t} dt = -i \cdot \text{sign}(\omega) = \begin{cases} -i, & \omega > 0, \\ 0, & \omega = 0, \\ i, & \omega < 0. \end{cases}$$

Таким образом, если $\tilde{X}(\omega)$ есть преобразование Фурье от $X(t)$, то

$$\tilde{H}_X(\omega) = -i \cdot \text{sign}(\omega) \cdot \tilde{X}(\omega) = \begin{cases} -i \cdot \tilde{X}(\omega), & \omega > 0, \\ 0, & \omega = 0, \\ i \cdot \tilde{X}(\omega), & \omega < 0. \end{cases}$$

Если представить $\tilde{X}(\omega) = |\tilde{X}(\omega)|e^{-i\varphi(\omega)}$, то

$$\tilde{H}_X(\omega) = \begin{cases} |\tilde{X}(\omega)|e^{-i(\varphi(\omega)+\pi/2)}, & \omega > 0, \\ 0, & \omega = 0, \\ |\tilde{X}(\omega)|e^{-i(\varphi(\omega)-\pi/2)}, & \omega < 0. \end{cases}$$

Практически более удобно вычислять преобразование Гильберта, используя понятия *аналитического сигнала*:

$$Z_X(t) = X(t) + i \cdot H_X(t) = |Z_X(t)| \cdot e^{i\theta(t)} \equiv A_X(t) \cdot e^{i\theta(t)},$$

где $A_X(t) = \sqrt{X^2(t) + H_X^2(t)}$ — амплитуды огибающей сигнала $X(t)$, а $\vartheta(t)$ — мгновенная фаза. Производная $\nu(t) = \frac{d\vartheta(t)}{dt}$ называется мгновенной частотой. Преобразование Фурье от аналитического сигнала имеет вид $\tilde{Z}_X(\omega) = \tilde{X}(\omega) + i \cdot \tilde{H}_X(\omega) = \tilde{X}(\omega) \cdot (1 + \text{sign}(\omega))$, или

$$\tilde{Z}_X(\omega) = \begin{cases} 2\tilde{X}(\omega), & \omega > 0, \\ \tilde{X}(0), & \omega = 0, \\ 0, & \omega < 0. \end{cases}$$

После чего преобразование Гильберта равно мнимой части от результата обратного преобразования Фурье от $\tilde{Z}_X(\omega)$:

$$H_X(t) = \text{Im} \left(\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{Z}_X(\omega) e^{i\omega t} d\omega \right).$$

Для сигнала с дискретным временем $X(t)$, $t = 0, \dots, (N-1)$, это преобразование может быть вычислено с помощью дискретного преобразования Фурье:

$$d_X^{(N)}(\omega_k) = \sum_{t=0}^{N-1} X(t) \cdot \exp(-i\omega_k t), \quad \omega_k = \frac{2\pi}{N}(k-1), \quad k = 0, 1, \dots, (N-1),$$

после чего вторую часть фурье-коэффициентов (соответствующую отрицательным частотам) следует обнулить: $h_X^{(N)}(\omega_k) = 0$, $k = \frac{N}{2} + 1, \dots, (N-1)$, тогда как первую часть — удвоить: $h_X^{(N)}(\omega_k) = 2 \cdot d_X^{(N)}(\omega_k)$, $k = 1, \dots, \frac{N}{2}$. После этого преобразование Гильберта вычисляется как мнимая часть обратного дискретного преобразования Фурье:

$$H_X(t) = \text{Im} \left(\sum_{k=0}^{N-1} h_X^{(N)}(\omega_k) \cdot \frac{\exp(i\omega_k t)}{N} \right), \quad t = 0, 1, \dots, (N-1).$$

Преобразование Гильберта применяется к результатам EEMD-разложения Хуанга, и получаемые временные ряды изменения мгновенных амплитуд огибающих и мгновенных частот могут быть предметом дальнейших исследований.

В качестве примера на рис. 5 приведем графики мгновенных амплитуд огибающих средних EEMD-волновых форм, представленных на рис. 4, вычисленных с помощью их преобразования Гильберта.

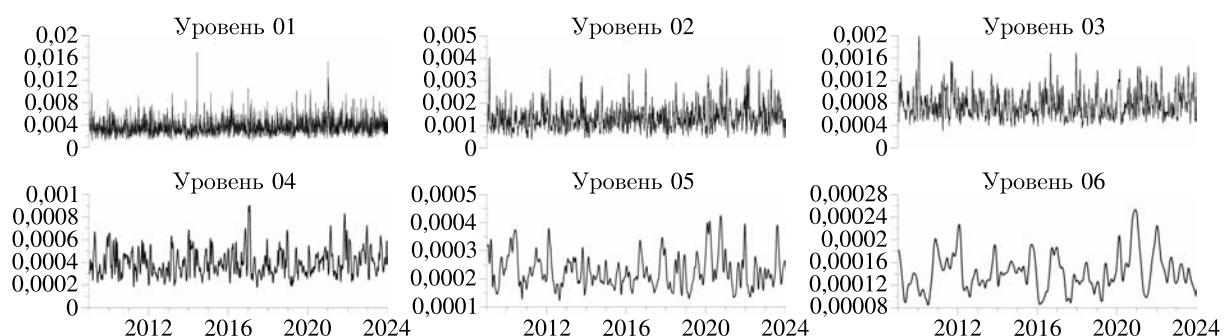


Рис. 5. Графики мгновенных амплитуд огибающих средних волновых форм EEMD для первых 6 уровней разложения

В поведении амплитуд огибающих на различных уровнях разложения имеется прогностическая информация, особенно в положении точек их локальных экстремумов. Но изложение исследований в этом направлении выходит за рамки данной статьи.

7. Алгоритм обнаружения аномального поведения временных рядов

В основе описанного ниже алгоритма лежит метод, изложенный в [Мурзагулов, Замятин, Романович, 2021]. Пусть дан временной ряд $x(k)$, $k = 1, \dots, N$. Для правого конца k временного окна длиной $(2w - 1)$ определим вектор, в который входят w временных фрагментов с положениями правых концов в точках $k, k - 1, k - 2, \dots, k - w + 1$,

$$x_k = (x(k - w + 1), x(k - w + 2), \dots, x(k))^T, \quad k = 2w - 1, \dots, N,$$

и $(w \times w)$ -матрицу

$$A'_k = \begin{pmatrix} x(k - 2w + 2) & x(k - 2w + 3) & \dots & x(k - w + 1) \\ x(k - 2w + 3) & x(k - 2w + 4) & \dots & x(k - w + 2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x(k - w + 1) & x(k - w + 2) & \dots & x(k) \end{pmatrix}, \quad k = 2w - 1, \dots, N.$$

Введем матрицу Q_k как разложение Холецкого матрицы $A_k = \text{cov}(A'_k)$: $A_k = Q_k \cdot Q_k^T$, где Q_k — верхняя треугольная матрица. Элементы матрицы A_k определяются по формулам

$$a_{i,j}^k = \frac{1}{w} \sum_{s=1}^w (x(k - 2w + i + s) - \bar{x}_i^k) (x(k - 2w + j + s) - \bar{x}_j^k), \quad \bar{x}_i^k = \frac{1}{w} \sum_{s=1}^w x(k - 2w + i + s).$$

Элементы верхней треугольной матрицы Q_k выше главной диагонали находятся из соотношения [Воеводин, Кузнецов, 1984]

$$q_{i,j}^k = \frac{1}{q_{i,i}^k} \left(a_{i,j}^k - \sum_{l=1}^{i-1} q_{l,i}^k q_{l,j}^k \right), \quad i = 1, \dots, w - 1, \quad j = i + 1, \dots, w,$$

где $a_{i,j}^k$ — соответствующие элементы матрицы A_k ; диагональные элементы матрицы Q_k определяются по формулам

$$q_{i,i}^k = \sqrt{a_{i,i}^k - \sum_{l=1}^{i-1} (q_{l,i}^k)^2}, \quad i = 1, \dots, w.$$

Следующим шагом получим вектор u_k , преобразовав x_k :

$$u_k = Q_k^{-1} \cdot (x_k - \bar{x}_k), \quad \bar{x}_k = \frac{1}{w} \sum_{i=1}^w x_k(i), \quad k = 2w - 1, \dots, N,$$

где $x_k(i)$ — i -я компонента вектора x_k . Смысл перехода от переменных x_k к переменным u_k заключается в том, что при больших w ($w \rightarrow \infty$), когда выборочные оценки ковариационных матриц стремятся к истинным, средние значения u_k стремятся к нулю, а их дисперсии стремятся к единице.

Вычислим выборочные оценки средних и дисперсий для u_k :

$$d_k = \frac{1}{w} \sum_{i=1}^w u_k(i), \quad \sigma_k^2 = \frac{1}{w} \sum_{i=1}^w (u_k(i) - d_k)^2, \quad k = 2w - 1, \dots, N.$$

По выборкам $\{d_{2w-1}, d_{2w}, \dots, d_N\}$ и $\{\sigma_{2w-1}^2, \sigma_{2w}^2, \dots, \sigma_N^2\}$ строятся эмпирические функции распределения F_d и F_{σ^2} соответственно, графики которых представлены на рис. 6.

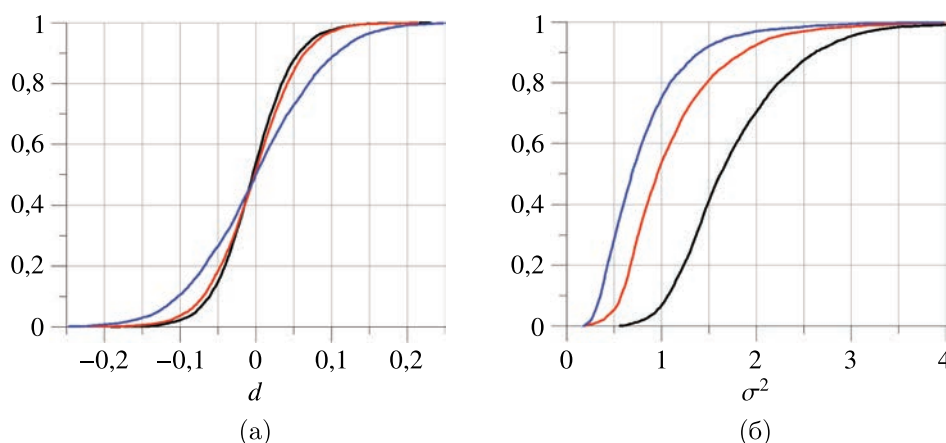


Рис. 6. Эмпирические функции распределения параметров разложения Холецкого для первых трех уровней разложения Хуанга: для параметров d_k (а), для параметров σ_k^2 (б). Черные линии — уровень 1, красные линии — уровень 2, синие линии — уровень 3

Теперь для статистик d_k и σ_k^2 , вычисленных для каждого положения правого конца k скользящего временного окна, по эмпирическим функциям распределения можно вычислить уровни значимости:

$$\alpha_{k,d} = F_d(d_k) \quad \text{и} \quad \alpha_{k,\sigma^2} = F_{\sigma^2}(\sigma_k^2), \quad k = 2w - 1, \dots, N,$$

которые затем сравниваются с определенным диапазоном, заданным через параметр α , и делается вывод о наличии ($S(k) = 1$) или отсутствии ($S(k) = 0$) аномалии в текущем временном окне с правым концом в точке k :

$$S(k) = \begin{cases} 0, & \text{если } \frac{\alpha}{2} \leq \alpha_{k,d} \leq 1 - \frac{\alpha}{2}, \\ 0, & \text{если } \frac{\alpha}{2} \leq \alpha_{k,\sigma^2} \leq 1 - \frac{\alpha}{2}, \\ 1, & \text{если иначе,} \end{cases} \quad k = 2w - 1, \dots, N.$$

Таким образом, при малых α значения $\frac{\alpha}{2}$ и $1 - \frac{\alpha}{2}$ — это критические значения эмпирической вероятности того, что статистики d_k и σ_k^2 не принимают аномальных значений, вероятность которых мала и равна α . Одно из важных достоинств алгоритма заключается в отсутствии необходимости в априорной информации об аномалиях.

Зададимся максимальным порогом $\alpha_{\max}$ и построим регулярную сетку на отрезке $[0, \alpha_{\max}]$ с некоторым шагом r_α . Пусть наборы сигналов, равных 0 или 1,

$$\{S_\alpha^j(k)\}, \quad k = 2w - 1, \dots, N, \quad 1 \leq j \leq 3, \quad \alpha = r_\alpha, 2r_\alpha, \dots, \alpha_{\max},$$

получены в результате применения описанного выше алгоритма обнаружения аномалий к каждой усредненной эмпирической моде; j — номер эмпирической моды; w и α — параметры алгоритма обнаружения аномалий. Мы не рассматриваем тривиальное значение, соответствующее левому концу отрезка $[0, \alpha_{\max}]$, то есть нулю, так как для него сигналы S_α^j будут нулевыми. Таким образом, статистики $S_\alpha^j(k)$ вычисляются последовательно для уровней EEMD-разложения 1, 2 и 3. Для каждого момента времени просуммируем аномалии по всем доступным значениям параметра α :

$$\tilde{S}_w^j(k) = \sum_{\alpha \in \{r_\alpha, \dots, \alpha_{\max}\}} S_{w,\alpha}^j(k), \quad k = 2w - 1, \dots, N, \quad 1 \leq j \leq 3.$$

Введем еще один параметр метода — длину L окна усреднения признаков наличия или отсутствия аномалии. Для каждого уровня EEMD-разложения в скользящем временном окне длиной L для каждого положения правого конца этого окна вычислим средние сигналы $\tilde{S}_w^j(k)$, $1 \leq j \leq 3$:

$$\tilde{U}_w^j(k) = \frac{1}{L} \sum_{s=1}^L \tilde{S}_w^j(k - L + s), \quad 1 \leq j \leq 3, \quad k = 2w - 1, \dots, N.$$

Для вычисления среднего по начальным значениям индекса k сигнал $\tilde{S}_w^j$ дополняется слева нулевым вектором длиной $L - 1$. Получившиеся таким образом сигналы $\tilde{U}_w^j(k)$, $1 \leq j \leq 3$, $k = 2w - 1, \dots, N$, которые назовем индексами аномального поведения временных рядов, усредняются дополнительно для каждого момента времени по всем используемым уровням EEMD-разложения j :

$$U_w(k) = \frac{1}{3} \sum_{j=1}^3 \tilde{U}_w^j(k), \quad k = 2w - 1, \dots, N. \quad (9)$$

Таким образом, алгоритм имеет 4 свободных параметра: w , $\alpha_{\max}$, r_α и L . Выберем максимальное пороговое значение $\alpha_{\max} = 0,1$ и шаг регулярной сетки $r_\alpha = 0,01$. Длину скользящего временного окна L определим равной 91 отсчета, т.е. примерно j года. Дальнейшее увеличение параметра $\alpha_{\max}$ не влияет на результат, заключающийся в предвестниковом эффекте, который будет проиллюстрирован ниже.

8. Связь индекса аномального поведения с выделением сейсмической энергии

Рассмотрим сейсмический процесс в окрестности Японских островов, взятой в виде окружности радиусом 1500 км с центром в точке центра масс положений кластеров сейсмических станций, представленных на рис. 1.

Данные взяты с сайта USGS (<https://earthquake.usgs.gov/earthquakes/search/>). На рис. 7 представлено распределение эпицентров достаточно сильных землетрясений (с магнитудой не ниже 5) в этой окрестности.

Определим $\lg E$ как логарифм суммарной высвободившейся сейсмической энергии в интервалах длиной 30 суток со смещением 1 сутки, график которой представлен на рис. 8, *а*. На рис. 8, *б* представлен итоговый индикатор аномального поведения (9) U_{120} . Значение параметра $w = 120$ было выбрано эмпирически путем перебора. Критерием служило количество отрицательных временных сдвигов, которые обеспечивают максимум модуля кросс-корреляционной функции Пирсона для сигналов U_{120} и $\lg E$, вычисленной в скользящем временном окне длиной 6 лет (2192 отсчетов — с учетом того, что в окне длиной 6 лет 2 года являются високосными).

Вычислим в пределах каждого временного окна длиной 6 лет коэффициенты корреляции между $U_{120}(t)$ и $\lg E(t + k)$, где временной сдвиг k изменяется в пределах $-k_{\max} \leq k \leq k_{\max}$, и выберем такой оптимальный временной сдвиг k^* , для которого абсолютное значение коэффициента корреляции максимально. На рис. 9 представлены результаты такой оценки. Для временного окна длиной 2192 значений мы брали максимальные временные сдвиги $k_{\max} = 182$: эти максимальные временные сдвиги соответствуют половине года.

Как видно из графика на рис. 9, *б*, значение временного сдвига k^* , который обеспечивает максимальные значения модуля коэффициента корреляции, всегда отрицательно. Отрицательные значения оптимального сдвига k^* , обеспечивающего максимум модуля корреляций, означают, что «в среднем» особенности поведения (локальные экстремумы) индикатора аномалий $U_{120}(t)$ предшествуют особенностям поведения логарифма выброса сейсмической энергии $\lg E$. Для тех интервалов времени длиной 6 лет, для которых на рис. 9, *а* максимальная абсолютная корреляция

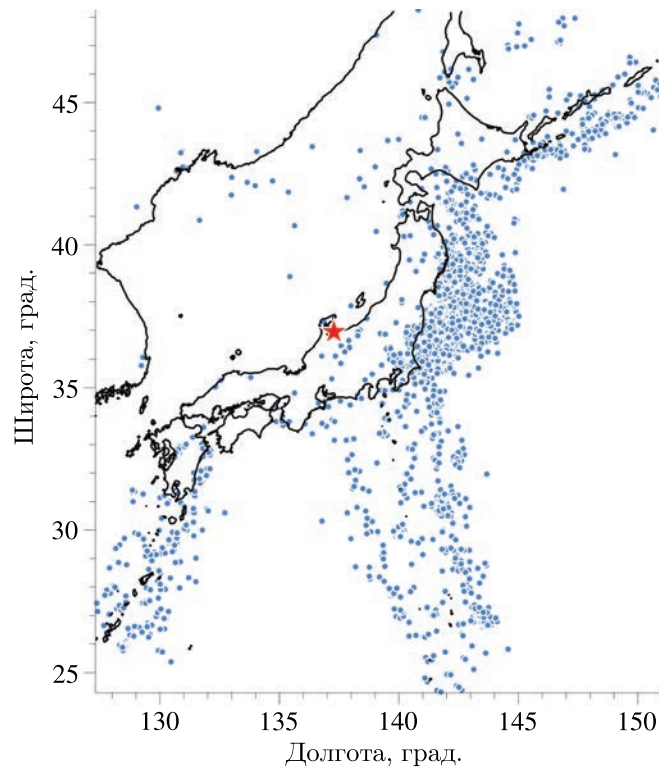


Рис. 7. Распределение эпицентров землетрясений с магнитудой не ниже 5 в окрестности Японских островов в радиусе 1500 км от центра масс всех центров кластеров (красная звездочка) для интервала времени 2009–2023 гг.

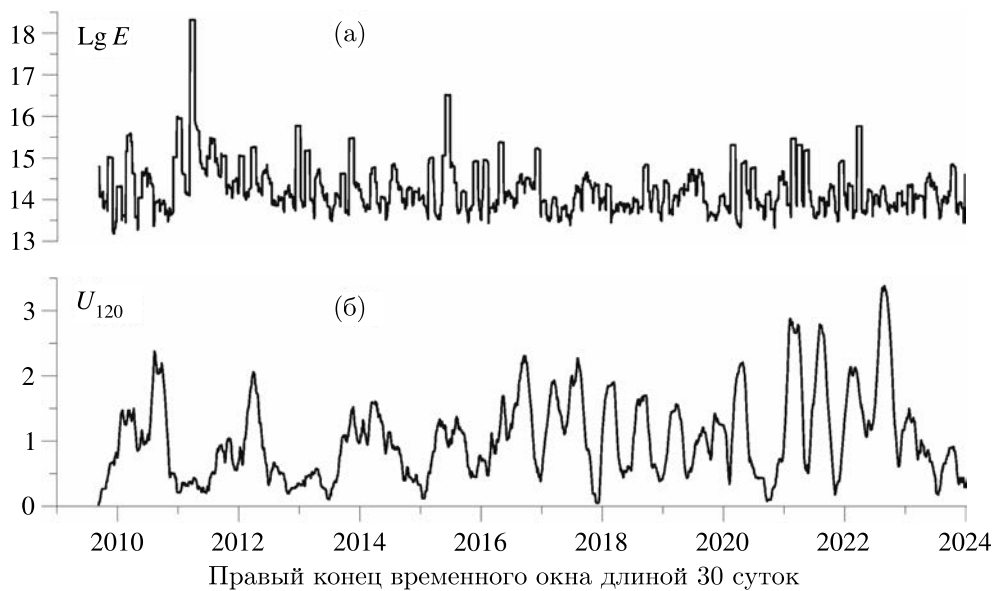


Рис. 8. а) График значений десятичного логарифма выделившейся сейсмической энергии (джоули) в скользящем временном окне длиной 30 суток со смещением 1 сутки в области, показанной на рис. 7; б) сигнал U_{120} . По горизонтальной оси отложены временные метки в годах

отрицательна, увеличение индикатора U_{120} через промежуток времени длиной k^* соответствует уменьшению выброса сейсмической энергии. Там же, где абсолютная корреляция положительна,

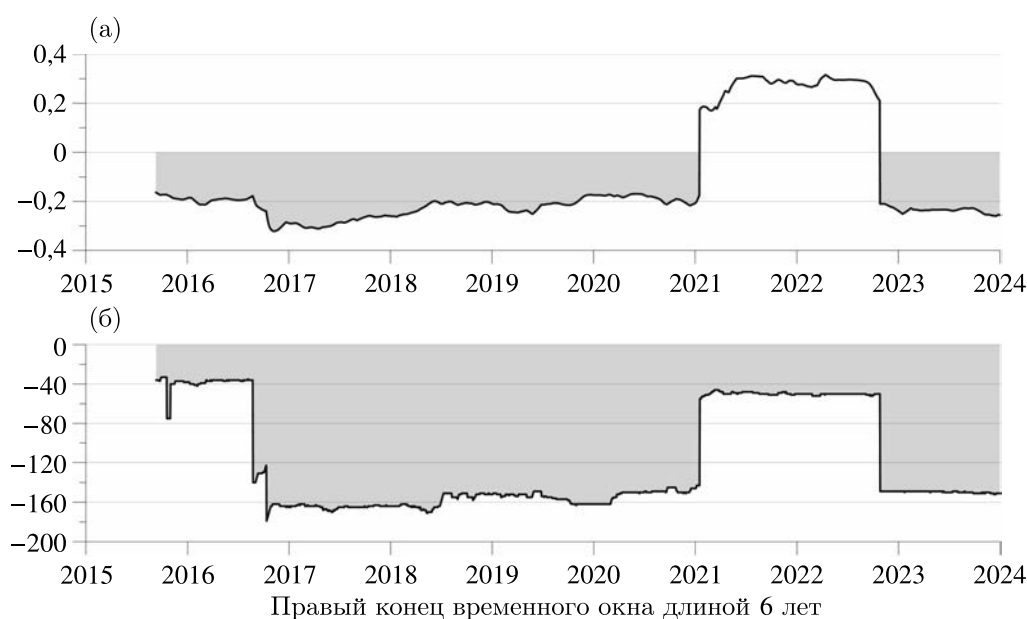


Рис. 9. а) Максимальные значения корреляций по их абсолютной величине между сигналами U_{120} и $\lg E$ во временном окне длиной 6 лет (2192 отсчетов); б) временные сдвиги внутри временного окна, обеспечивающие максимальные значения модулей корреляций. В каждом временном окне сдвиги варьируются в пределах ± 182 отсчета

но значение k^* все равно отрицательно, означает, что, наоборот, всплески индикатора аномального поведения U_{120} со средней временной задержкой k^* предшествуют увеличению выброса сейсмической энергии.

И в том и в другом случае отрицательные значения оптимальных временных сдвигов k^* интерпретируются как проявление прогностического эффекта в поведении тремора земной поверхности на временном масштабе, определяемом параметром максимального временного сдвига $k_{\max}$, который у нас выбран равным половине года.

9. Обсуждение и выводы

Предложен метод исследования тремора земной поверхности, регистрируемого средствами космической геодезии, основанный на использовании кластерного анализа, метода главных компонент и разложения Хуанга. Целью анализа является обнаружение прогностических эффектов с использованием статистики аномального поведения, основанного на операции нормализации ковариационной матрицы компонент Хуанга в скользящем временном окне путем ее разложения Холецкого. В результате оптимизации параметров статистики аномального поведения удалось показать существование прогностического эффекта относительно интенсивности выделения сейсмической энергии для данных ежесуточных вертикальных смещений земной поверхности на сети из 1047 GPS-станций на Японских островах для промежутка времени 2009–2023 гг.

Следует отметить, что предложенный метод анализа «больших» данных мониторинга является многоступенчатым и требует процедуры «наладки», заключающейся в подборе таких параметров, которые обеспечили бы наиболее выразительный результат. Часть параметров определяется с помощью формальных процедур, например число и положение центров кластеров станций, представленных на рис. 1. Важный свободный параметр метода — это длина скользящего окна адаптации для вычисления средне взвешенных временных рядов на основе метода главных компонент, которая была выбрана равной 365 суткам для рассматриваемых ежесуточных

временных рядов. Этот выбор был сделан из геофизических соображений, поскольку почти все процессы в твердой и жидкой оболочках Земли подчиняются сильным годовым периодичностям. Алгоритм выделения аномального поведения в средних волновых EEMD-формах также содержит настраиваемые параметры, указанные выше. Для сопоставления с сейсмическим режимом была выбрана круговая область радиусом 1500 км с центром в центре тяжести положений кластеров. Это расстояние обеспечивает включение в анализ сейсмических событий во всех основных разломах между четырьмя тектоническими плитами, которые сходятся в районе Японских островов.

Реализация метода не требует привлечения мощных вычислительных ресурсов и может быть проведена в течение одного рабочего дня с использованием персонального компьютера класса desktop с процессором Intel(R) Core(TM) i9-7940X и 32 гигабайтами оперативной памяти. Наиболее трудоемкая часть метода — это усреднение EMD-волновых форм с целью получения EEMD-реализаций путем усреднения 1000 разложений Хуанга с добавлением независимых белых шумов.

Список литературы (References)

- Айвазян С. А., Бухштабер В. М., Енюков И. С., Мешалкин Л. Д. Прикладная статистика. Классификация и снижение размерности. — М.: Финансы и статистика, 1989.
- Ayvazyan S. A., Buhstaber V. M., Enyukov I. S., Meshalkin L. D. Prikladnaya statistika. Klassifikatsiya i snizhenie razmernosti [Applied statistics. Classification and reduction of dimensionality]. — Moscow: Finansy i statistika, 1989 (in Russian).
- Воеводин В. В., Кузнецов Ю. А. Матрицы и вычисления. — М.: Наука, 1984. — 320 с.
- Voevodin V. V., Kuznetsov Yu. A. Matricy i vychisleniya [Matrices and calculations]. — Moscow: Nauka, 1984 (in Russian).
- Давыдов В. А., Давыдов А. В. Очистка геофизических данных от шумов с использованием преобразования Гильберта–Хуанга // Актуальные инновационные исследования: наука и практика. Тамбовский государственный университет имени Г. Р. Державина. — 2010. — № 1. — <https://elibrary.ru/item.asp?id=16366484>
- Davydov V. A., Davydov A. V. Ochistka geofizicheskikh dannykh ot шумов s ispol'zovaniem preobrazovaniia Gil'berta–Huanga [Denoising geophysical data using the Hilbert–Huang transform] // Aktual'nye innovatsionnye issledovaniia: nauka i praktika. Tambovskij gosudarstvennyj universitet imeni G. R. Derzhavina. — 2010. — No. 1 (in Russian).
- Миронов Д. С., Лебига В. А., Мяс Дж. Дж., Пак А. Ю., Зиновьев В. Н. Применение преобразования Гильберта–Хуанга для анализа пульсаций за прямым круговым цилиндром // Сибирский физический журнал. — 2017. — Т. 12, № 3. — С. 49–59. — <https://doi.org/10.25205/2541-9447-2017-12-3-49-59>
- Mironov D. S., Lebiga V. A., Mias Dzh. Dzh., Pak A. Yu., Zinov'ev V. N. Primenenie preobrazovaniia Gil'berta–Huanga dlia analiza pul'sacij za priamym krugovym cilindrom [Application of the Hilbert–Huang transform to analyze pulsations behind a right circular cylinder] // Sibirskij fizicheskij zhurnal. — 2017. — Vol. 12, No. 3. — P. 49–59 (in Russian).
- Мурзагулов Д. А., Замятин А. В., Романович О. В. Подход к обнаружению аномалий в технологических сигналах с применением преобразования Гильберта–Хуанга // Автотметрия. — 2021. — Т. 21, № 7. — С. 31–41. — <https://doi.org/10.15372/AUT20210104>
- Murzagulov D. A., Zamiatin A. V., Romanovich O. V. Podhod k obnaruzheniiu anomalij v tehnologicheskikh signalah s primeneniem preobrazovaniia Gil'berta–Huanga [An approach to detecting anomalies in process signals using the Hilbert–Huang transform] // Avtometriia. — 2021. — Vol. 21, No. 7. — P. 31–41 (in Russian).
- Павлов А. Н., Филатова А. Е. Метод эмпирических мод и вейвлет-фильтрация: применение в задачах геофизики // Известия вузов. Прикладная нелинейная динамика. — 2011. — Т. 19, № 1. — С. 3–13. — <https://doi.org/10.18500/0869-6632-2011-19-1-3-13>
- Pavlov A. N., Filatova A. E. Metod empiricheskikh mod i vejvlet-fil'traciia: primenenie v zadachah geofiziki [Empirical mode method and wavelet filtering: application in geophysics problems] // Izvestiia vuzov. Prikladnaia nelinejnaia dinamika. — 2011. — Vol. 19, No. 1. — P. 3–13 (in Russian).
- Ястребов И. П. О свойствах и применениях преобразования Гильберта–Хуанга // Проектирование и технология электронных средств. — 2016. — № 1. — С. 26–33. — <https://elibrary.ru/item.asp?id=26379116>
- Yastrebov I. P. O svoystvah i primeneniiah preobrazovaniia Gil'berta–Huanga [On the properties and applications of

- the Hilbert–Huang transform] // *Proektirovanie i tehnologiiia elektronnyh sredstv.* — 2016. — No. 1. — P. 26–33 (in Russian).
- Agnew D.* The time domain behavior of power law noises // *Geophys. Res. Lett.* — 1992. — Vol. 19. — P. 333–336. — <https://doi.org/10.1029/91GL02832>
- Amiri-Simkooei A. R., Tiberius C. C. J. M., Teunissen P. J. G.* Assessment of noise in GPS coordinate time series: Methodology and results // *J. Geophys. Res.* — 2007. — Vol. 112. — B07413. — <https://doi.org/10.1029/2006JB004913>
- Bendat J. S., Piersol A. G.* Random data. Analysis and measurement procedures. — Fourth Edition. — New Jersey: Wiley & Sons, 2010.
- Blewitt G., Hammond W. C., Kreemer C.* Harnessing the GPS data explosion for interdisciplinary science // *Eos.* — 2018. — No. 99. — <https://doi.org/10.1029/2018EO104623>
- Blewitt G., Lavallee D.* Effects of annual signal on geodetic velocity // *J. Geophys. Res.* — 2002. — Vol. 107, No. B7. — P. 2145. — <https://doi.org/10.1029/2001JB000570>
- Bos M. S., Bastos L., Fernandes R. M. S.* The influence of seasonal signals on the estimation of the tectonic motion in short continuous GPS time-series // *J. Geodynamics.* — 2010. — Vol. 49, No. 3–4. — P. 205–209. — <https://doi.org/10.1016/j.jog.2009.10.005>
- Bos M. S., Fernandes R. M. S., Williams S. D. P., Bastos L.* Fast error analysis of continuous GPS observations // *J. Geod.* — 2008. — Vol. 82, No. 3. — P. 157–166. — <https://doi.org/10.1007/s00190-007-0165-x>
- Caporali A.* Average strain rate in the Italian crust inferred from a permanent GPS network. — I. Statistical analysis of the time-series of permanent GPS stations // *Geophys. J. Int.* — 2003. — Vol. 155. — P. 241–253. — <https://doi.org/10.1046/j.1365-246X.2003.02034.x>
- Chanard K., Avouac J. P., Ramillien G., Genrich J.* Modeling deformation induced by seasonal variations of continental water in the Himalaya region: Sensitivity to Earth elastic structure // *J. Geophys. Res. Solid Earth.* — 2014. — Vol. 119. — P. 5097–5113. — <https://doi.org/10.1002/2013JB010451>
- Chen Q., van Dam T., Sneeuw N., Collilieux X., Weigelt M., Rebischung P.* Singular spectrum analysis for modeling seasonal signals from GPS time series // *J. Geodyn.* — 2013. — Vol. 72. — P. 25–35. — <https://doi.org/10.1016/j.jog.2013.05.005>
- Duda R. O., Hart P. E., Stork D. G.* Pattern classification. — New York, Chichester, Brisbane, Singapore, Toronto: Wiley-Interscience Publication, 2000.
- Filatov D. M., Lyubushin A. A.* Fractal analysis of GPS time series for early detection of disastrous seismic events // *Phys. A.* — 2017. — Vol. 469, No. 1. — P. 718–730. — <http://dx.doi.org/10.1016/j.physa.2016.11.046>
- Filatov D. M., Lyubushin A. A.* Precursory analysis of GPS time series for seismic hazard assessment // *Pure and Applied Geophysics.* — 2019. — Vol. 177, No. 1. — P. 509–530. — <https://doi.org/10.1007/s00024-018-2079-3>
- Fu Y., Argus D. F., Freymueller J. T., Heflin M. B.* Horizontal motion in elastic response to seasonal loading of rain water in the Amazon Basin and monsoon water in Southeast Asia observed by GPS and inferred from GRACE // *Geophys. Res. Lett.* — 2013. — Vol. 40. — P. 6048–6053. — <https://doi.org/10.1002/2013GL058093>
- Huang N. E., Shen Z., Long S. R., Wu V. C., Shih H. H., Zheng Q., Yen N. C., Tung C. C., Liv H. H.* The empirical mode decomposition and the Hilbert spectrum for nonlinear and non-stationary time series analysis // *Proc. Roy. Soc. London Ser. A.* — 1998. — Vol. 454. — P. 903–995. — <https://doi.org/10.1098/rspa.1998.0193>
- Huang N. E., Wu Z.* A review on Hilbert–Huang transform: Method and its applications to geophysical studies // *Rev. Geophys.* — 2008. — Vol. 46, No. 2. — RG2006. — <https://doi.org/10.1029/2007RG000228>

- Huang N. E., Wu M., Qu W., Long S. R., Shen S. S. P. Applications of Hilbert–Huang transform to non-stationary financial time series analysis // *Appl. Stochastic Models Bus. Ind.* — 2003. — Vol. 19. — P. 245–268. — <https://doi.org/10.1002/asmb.501>
- Huang Y., Schmitt F. G., Lu Zh., Liu Y. Analysis of daily river flow fluctuations using empirical mode decomposition and arbitrary order Hilbert spectral analysis // *Journal of Hydrology*. — 2009. — Vol. 373. — P. 103–111. — <https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2009.04.015>
- Huber P. J. Robust statistics. — N. Y., Chichester, Brisbane, Toronto: Wiley, 1981.
- Jolliffe I. T. Principal component analysis — Springer Series in Statistics. — New York, NY: Springer, 2002.
- Kermarrec G., Schon S. On modelling GPS phase correlations: a parametric model // *Acta Geod Geophys.* — 2018. — Vol. 53. — P. 139–156. — <https://doi.org/10.1007/s40328-017-0209-5>
- Li H., Kwong S., Yang L., Huang D., Xiao D. Hilbert–Huang transform for analysis of heart rate variability in cardiac health // *IEEE/ACM Trans Comput. Biol. Bioinform.* — 2011. — Vol. 8, No. 6. — P. 1557–1567. — <https://doi.org/10.1109/TCBB.2011.43>
- Li J., Miyashita K., Kato T., Miyazaki S. GPS time series modeling by autoregressive moving average method. Application to the crustal deformation in central Japan // *Earth Planets Space*. — 2000. — Vol. 52. — P. 155–162. — <https://doi.org/10.1186/BF03351624>
- Li W., Guo J. Extraction of periodic signals in Global Navigation Satellite System (GNSS) vertical coordinate time series using the adaptive ensemble empirical modal decomposition method // *Nonlin. Processes Geophys.* — 2024. — Vol. 31. — P. 99–113. — <https://doi.org/10.5194/npg-31-99-2024>
- Liu B., Dai W., Liu N. Extracting seasonal deformations of the Nepal Himalaya region from vertical GPS position time series using Independent Component Analysis // *Adv. Space Res.* — 2017. — Vol. 60. — P. 2910–2917. — <https://doi.org/10.1016/j.asr.2017.02.028>
- Liu B., Xing X., Tan J., Xia Q. Modeling seasonal variations in vertical GPS coordinate time series using independent component analysis and varying coefficient regression // *Sensors*. — 2020. — Vol. 20. — P. 5627. — <https://doi.org/10.3390/s20195627>
- Lyubushin A. Entropy of GPS-measured Earth tremor // *Revolutionizing Earth Observation. New Technologies and Insights*. — 2024. — <http://dx.doi.org/10.5772/intechopen.1004399>
- Lyubushin A. Field of coherence of GPS-measured earth tremors // *GPS Solutions*. — 2019. — Vol. 23. — P. 120. — <https://doi.org/10.1007/s10291-019-0909-0>
- Lyubushin A. Global coherence of GPS-measured high-frequency surface tremor motions // *GPS Solutions*. — 2018. — Vol. 22. — P. 116. — <https://doi.org/10.1007/s10291-018-0781-3>
- Lyubushin A. Identification of areas of anomalous tremor of the Earth's surface on the Japanese Islands according to GPS data // *Applied Sciences*. — 2022. — Vol. 12. — P. 7297. — <https://doi.org/10.3390/app12147297>
- Lyubushin A. Singular points of the tremor of the Earth's surface // *Applied Sciences*. — 2023. — Vol. 13. — P. 10060. — <https://doi.org/10.3390/app131810060>
- Pan Y., Shen W.-B., Ding H., Hwang C., Li J., Zhang T. The quasi-biennial vertical oscillations at Global GPS stations: identification by ensemble empirical mode decomposition // *Sensors*. — 2015. — Vol. 15. — P. 26096–26114. — <https://doi.org/10.3390/s151026096>
- Ray J., Altamimi Z., Collilieux X., van Dam T. Anomalous harmonics in the spectra of GPS position estimates // *GPS Solutions*. — 2008. — Vol. 12. — P. 55–64. — <https://doi.org/10.1007/s10291-007-0067-7>
- Roncagliolo P. A., García J. G., Mercader P. I., Fuhrmann D. R., Muravchik C. H. Maximum-likelihood attitude estimation using GPS signals // *Digital Signal Processing*. — 2007. — Vol. 17. — P. 1089–1100. — <https://doi.org/10.1016/j.dsp.2006.09.001>

- Teferle F.N., Williams S.D.P., Kierulf H.P., Bingley R.M., Plag H.P.* A continuous GPS coordinate time series analysis strategy for high-accuracy vertical land movements // *Phys. Chem. Earth, Parts A/B/C.* — 2008. — Vol. 33, No. 3–4. — P. 205–216. — <https://doi.org/10.1016/j.pce.2006.11.002>
- Tesmer V., Steigenberger P., van Dam T., Mayer-Gurr T.* Vertical deformations from homogeneously processed GRACE and global GPS long-term series // *J. Geod.* — 2011. — Vol. 85. — P. 291–310. — <https://doi.org/10.1007/s00190-010-0437-8>
- Vogel M.A., Wong A.K.C.* PFS clustering method // *IEEE Trans. Pattern Anal. Mach. Intell.* — 1979. — Vol. 1, No. 3. — P. 237–245. — <https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/21868854/>
- Wang F., Li H., Lu M.* GNSS spoofing detection and mitigation based on maximum likelihood estimation // *Sensors.* — 2017. — Vol. 17. — P. 1532. — <https://doi.org/10.3390/s17071532>
- Wang W., Zhao B., Wang Q., Yang S.* Noise analysis of continuous GPS coordinate time series for CMONOC // *Adv. Space Res.* — 2012. — Vol. 49, No. 5. — P. 943–956. — <https://doi.org/10.1016/j.asr.2011.11.032>
- Wei H.-Ch., Xiao M.-X., Chen H.-Y., Li Y.-Q., Wu H.-T., Sun Ch.-K.* Instantaneous frequency from Hilbert–Huang transformation of digital volume pulse as indicator of diabetes and arterial stiffness in upper-middle-aged subjects // *Scientific Reports.* — 2018. — Vol. 8. — P. 15771. — <https://doi.org/10.1038/s41598-018-34091-6>
- Yan J., Dong D., Burgmann R., Materna K., Tan W., Peng Y., Chen J.* Separation of sources of seasonal uplift in China using independent component analysis of GNSS time series // *J. Geophys. Res. Solid Earth.* — 2019. — Vol. 124. — P. 11951–11971. — <https://doi.org/10.1029/2019JB018139>
- Zhang J., Bock Y., Johnson H., Fang P., Williams S., Genrich J., Wdowinski S., Behr J.* Southern California permanent GPS geodetic array: Error analysis of daily position estimates and site velocities // *J. Geophys. Res.* — 1997. — Vol. 102, No. B8. — P. 18035–18055. — <https://doi.org/10.1029/97JB01380>

УДК: 519.2

Стохастические переходы от порядка к хаосу в метапопуляционной модели с миграцией

А. В. Беляев

Уральский федеральный университет,
Россия, 620000, г. Екатеринбург, ул. Ленина, д. 51

E-mail: belyaev.alexander1337@yandex.ru

Получено 25.03.2024, после доработки — 23.06.2024.

Принято к публикации 24.06.2024.

Данная работа посвящена исследованию проблемы моделирования и анализа динамических режимов, как регулярных, так и хаотических, в системах связанных популяций в присутствии случайных возмущений. В качестве исходной детерминированной популяционной модели рассматривается дискретная модель Рикера. В работе исследуется динамика двух популяций, связанных миграцией. Миграция пропорциональна разнице между плотностями двух популяций с коэффициентом связи, который отвечает за силу миграционного потока. Изолированные популяционные подсистемы, не учитывающие миграцию и моделируемые отображением Рикера, демонстрируют различные динамические режимы: равновесный, периодический и хаотический. В данной работе в качестве бифуркационного параметра используется коэффициент связи, а также фиксируются параметры естественного прироста популяций, при которых одна из подсистем находится в равновесном режиме, а во второй преобладает хаотический режим. Связывание двух популяций посредством миграции порождает новые динамические режимы, не наблюдавшиеся в изолированной модели. Целью данной статьи является анализ динамических режимов корпоративной динамики при вариации интенсивности перетоков между популяционными подсистемами. В статье представлен бифуркационный анализ аттракторов детерминированной модели двух связанных популяций, выявлены зоны моно- и бистабильности, даны примеры регулярных и хаотических аттракторов. Основной акцент данной работы сделан на сравнении устойчивости динамических режимов к случайным возмущениям в коэффициенте интенсивности миграции. Методами прямого численного моделирования выявлены и описаны индуцированные шумом переходы с периодического аттрактора на хаотический. В статье представлены результаты анализа стохастических явлений с помощью показателя Ляпунова. Показано, что в рассматриваемой модели существует зона изменения бифуркационного параметра, при котором даже с увеличением интенсивности случайных возмущений не происходит переход от порядка к хаосу. Для аналитического исследования вызванных шумом переходов применены техника функции стохастической чувствительности и метод доверительных областей. В работе показано, как с помощью этого математического аппарата можно предсказать критическую интенсивность шума, вызывающую трансформацию периодического режима в хаотический.

Ключевые слова: метапопуляция, связанные системы, случайные возмущения, стохастическая чувствительность, переход «порядок – хаос», модель Рикера

Работа выполнена при поддержке Уральского математического центра (соглашение 075-02-2024-1428).

UDC: 519.2

Stochastic transitions from order to chaos in a metapopulation model with migration

A. V. Belyaev

Ural Federal University,
51 Lenina st., Ekaterinburg, 620000, Russia

E-mail: belyaev.alexander1337@yandex.ru

Received 25.03.2024, after completion — 23.06.2024.

Accepted for publication 24.06.2024.

This paper focuses on the problem of modeling and analyzing dynamic regimes, both regular and chaotic, in systems of coupled populations in the presence of random disturbances. The discrete Ricker model is used as the initial deterministic population model. The paper examines the dynamics of two populations coupled by migration. Migration is proportional to the difference between the densities of two populations with a coupling coefficient responsible for the strength of the migration flow. Isolated population subsystems, modeled by the Ricker map, exhibit various dynamic modes, including equilibrium, periodic, and chaotic ones. In this study, the coupling coefficient is treated as a bifurcation parameter and the parameters of natural population growth rate remain fixed. Under these conditions, one subsystem is in the equilibrium mode, while the other exhibits chaotic behavior. The coupling of two populations through migration creates new dynamic regimes, which were not observed in the isolated model. This article aims to analyze the dynamics of corporate systems with variations in the flow intensity between population subsystems. The article presents a bifurcation analysis of the attractors in a deterministic model of two coupled populations, identifies zones of monostability and bistability, and gives examples of regular and chaotic attractors. The main focus of the work is in comparing the stability of dynamic regimes against random disturbances in the migration intensity. Noise-induced transitions from a periodic attractor to a chaotic attractor are identified and described using direct numerical simulation methods. The Lyapunov exponents are used to analyze stochastic phenomena. It has been shown that in this model, there is a region of change in the bifurcation parameter in which, even with an increase in the intensity of random perturbations, there is no transition from order to chaos. For the analytical study of noise-induced transitions, the stochastic sensitivity function technique and the confidence domain method are used. The paper demonstrates how this mathematical tool can be employed to predict the critical noise intensity that causes a periodic regime to transform into a chaotic one.

Keywords: metapopulation, coupled systems, random disturbances, stochastic sensitivity, chaos – order transition, Ricker model

Citation: *Computer Research and Modeling*, 2024, vol. 16, no. 4, pp. 959–973 (Russian).

This work was supported by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (project 075-02-2024-1428) for the development of the regional scientific and educational mathematical center “Ural Mathematical Center”.

Введение

В настоящее время исследовательский интерес в области математического моделирования направлен на изучение сложных явлений, наблюдаемых в связанных системах. Большое количество работ посвящено таким явлениям, как синхронизация [Pikovski, Rosenblum, Kurths, 2001; Boccaletti et al., 2018] и самоорганизация [Nicolis, Prigogine, 1977; Cross, Greenside, 2009]. В последнее время активно исследуются динамические режимы химер в связанных системах (см., например, [Kuramoto, Battogtokh, 2002; Panaggio, Abrams, 2015; Zakharova, 2020]). Наряду с моделями связанных механических, электронных и нейронных систем, которые рассматривались уже давно, начали изучаться модели метапопуляций [Базыкин, 2003]. Ключевое в этом термине — наличие на некотором ареале достаточно изолированных местообитаний с проживающими в них локальными популяциями (субпопуляциями), особи которых совершают постоянные или сезонные миграции из одного местообитания в другое [Фрисман и др., 2019]. Например, местообитания популяций могут быть сформированы неоднородно, и, предположив, что для развития популяции значимыми процессами являются размножение и зимовка, миграция может быть только один раз за сезон, а именно либо до периода размножения, либо после него [Кулаков, Фрисман, 2010].

Предложенная Робертом Мэйем исследовательская парадигма «простая модель – сложная динамика» [May, 1976] является важной отправной точкой во многих различных исследованиях. Простые модели метапопуляций, описывающие сложные сценарии совместной динамики двух популяций логистического типа, рассматривались во многих работах (см., например, [Sakaguchi, Tomita, 1987; Maistrenko et al., 1998; Tanaka, Sanjuán, Aihara, 2005; Bashkirtseva, Ryashko, 2021a]). В этих моделях были обнаружены различные нелинейные динамические режимы, такие как мультистабильность, трансверсальная неустойчивость и фрактальные бассейны [Maistrenko et al., 1998], двухпериодические хаотические аттракторы [Sakaguchi, Tomita, 1987], вызванная кризисом перемежаемость [Tanaka, Sanjuán, Aihara, 2005], двумерные торы [Жусубалиев, Яночкина, 2009] и т. д. В качестве основного инструмента для анализа этих режимов и их трансформаций используется современная теория бифуркаций.

Следует принять во внимание тот факт, что в популяционных системах неопределенность окружающей среды является важным фактором. Случайные колебания среды могут кардинально изменить динамическое поведение системы, порождая режимы, не имеющие аналогов в исходной детерминированной модели (см., например, [Lande, Engen, Saether, 2003; Greenman, Benton, 2005]). Шум в нелинейных системах играет конструктивную роль [Horsthemke, Lefever, 1984; Anishchenko et al., 2007]. В настоящее время для моделей связанных систем активно изучаются индуцированные шумом изменения режимов динамики, синхронизация и переходы «порядок – хаос» (см., например, [Kraut, Feudel, 2002; Lin, Chen, 2006; Sun, Zhao, 2012; Zhang et al., 2020; Bashkirtseva, Ryashko, Pisarchik, 2021; Rybalova et al., 2022; Ryashko, Belyaev, Bashkirtseva, 2023]).

В анализе стохастических явлений, наряду с традиционными методами прямого численного моделирования, активно разрабатывается подход, который основан на аналитических аппроксимациях вероятностных распределений. Для описания разброса случайных состояний вокруг аттракторов используются доверительные области, построенные с помощью метода функции стохастической чувствительности (ФСЧ) [Башкирцева, Ряшко, Цветков, 2009; Bashkirtseva, Ryashko, Tsvetkov, 2010; Bashkirtseva, Ryashko, 2021b]. Эффективность этого подхода при анализе стохастических моделей из различных областей естествознания была показана в работах [Беляев, Перевалова, 2020; Bashkirtseva, Ryashko, 2017; Ryashko, 2018; Bashkirtseva, Ryashko, Pisarchik, 2021; Alexandrov et al., 2021].

Наряду с классическим логистическим отображением, в математическом моделировании динамики популяций широко используется дискретная модель, предложенная Рикером [Ricker,

1954; Quinn, Deriso, 1999; Bjorkstedt, 2012; Bashkirtseva, Ryashko, 2018]. Например, в статье [Кулаков, Фрисман, 2010] исследуются бифуркационные механизмы синфазной и противофазной синхронизации мультистабильных режимов систем связанных отображений, построенных на основе модели Рикера и описывающих динамику популяций с миграцией. В настоящей работе рассматривается система, состоящая из двух связанных подсистем, каждая из которых моделируется дискретным отображением Рикера. Изолированные подсистемы могут демонстрировать различные динамические режимы: равновесный, периодический и хаотический. Анализ стохастических эффектов в метапопуляциях с миграцией проводился в работах [Belyaev, Bashkirtseva, Ryashko, 2022; Ryashko, Belyaev, Bashkirtseva, 2023]. Целью данной статьи является анализ динамических режимов корпоративной динамики при вариации интенсивности перетоков между популяционными подсистемами, одна из которых изначально находится в равновесном режиме, а другая — в хаотическом. В работе сделан акцент на сравнении устойчивости режимов к случайным воздействиям. Показано наличие параметрических зон, в которых даже при малых шумах происходит хаотизация динамического режима, и зон, в которых сохраняется режим порядка и при больших интенсивностях шума.

Режимы динамики детерминированной модели

Исходная детерминированная модель Рикера имеет вид

$$N_{t+1} = N_t \exp\left(\mu\left(1 - \frac{N_t}{K}\right)\right), \quad (1)$$

где N_t — численность популяции в момент времени t , μ — параметр естественного прироста, а K — емкость экологической ниши. Биологический смысл параметра K можно прояснить следующим образом: если $N_t > K$, то $1 - \frac{N_t}{K} < 0$, и тогда $N_{t+1} < N_t$, что означает уменьшение численности популяции. Таким образом, K играет роль порогового значения.

Введение новой биофизической переменной $x_t = \frac{N_t}{K}$, характеризующей демографическое давление, создаваемое популяцией размера N_t в экологической нише размером K , позволяет исключить из уравнения (1) параметр K и исследовать зависимость режимов поведения только от параметра μ :

$$x_{t+1} = x_t \exp(\mu(1 - x_t)).$$

При этом величина K играет роль простого масштабирующего множителя: $N_t = Kx_t$.

Тогда динамика изолированной популяции моделируется следующим образом:

$$x_{t+1} = f(\mu, x_t), \quad f(\mu, x) = x \exp(\mu(1 - x)), \quad (2)$$

где μ — параметр естественного прироста. На рис. 1 изображена бифуркационная диаграмма модели (2) при изменении параметра μ . При $0 \leq \mu < 2$ система имеет в качестве аттрактора устойчивое равновесие. С увеличением параметра μ оно теряет устойчивость, и наблюдается каскад бифуркаций удвоения периода с последующим чередованием параметрических зон порядка и хаоса.

В статье изучается двумерная метапопуляционная модель, состоящая из двух подсистем, связанных взаимной миграцией:

$$\begin{cases} N_{t+1} = N_t \exp\left(\mu_1\left(1 - \frac{N_t}{K_1}\right)\right) + \eta_t, \\ M_{t+1} = M_t \exp\left(\mu_2\left(1 - \frac{M_t}{K_2}\right)\right) - \eta_t, \end{cases} \quad (3)$$

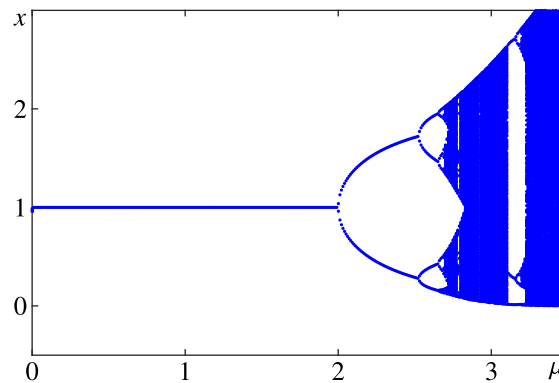


Рис. 1. Бифуркационная диаграмма изолированной системы Рикера (2)

где N_t и M_t — численности популяций. Каждая из популяций имеет свой коэффициент естественного прироста и свой размер экологической ниши. Предполагается, что взаимная миграция η_t определяется разностью соответствующих демографических давлений $\frac{N_t}{K_1}$ и $\frac{M_t}{K_2}$:

$$\eta_t = \sigma \left(\frac{M_t}{K_2} - \frac{N_t}{K_1} \right) \quad (4)$$

с коэффициентом пропорциональности σ . Переходя к переменным

$$x_t = \frac{N_t}{K_1}, \quad y_t = \frac{M_t}{K_2},$$

запишем замкнутую систему (3), (4) в виде

$$\begin{cases} x_{t+1} = f(\mu_1, x_t) + \sigma(y_t - x_t), \\ y_{t+1} = f(\mu_2, y_t) - \sigma(y_t - x_t). \end{cases} \quad (5)$$

ЗАМЕЧАНИЕ 1. Следует отметить, что в литературе рассматриваются две базовые модели связанных популяций: 1) связь по переменным (см., например, работы [Sakaguchi, Tomita, 1987; Lloyd, 1995; Жусубалиев, Яночкина, 2009]); 2) функциональная связь (см., например, работы [Hastings, 1993; Кулаков, Фрисман, 2010]). Схематично эти модели можно представить так. Пусть динамика изолированных популяций задается следующим образом:

$$x_{t+1} = f(x_t), \quad y_{t+1} = g(y_t).$$

Тогда связь по переменным описывается так:

$$x_{t+1} = f(x_t) + \sigma(y_t - x_t), \quad y_{t+1} = g(y_t) - \sigma(y_t - x_t),$$

а функциональная связь заключается в следующем:

$$x_{t+1} = f(x_t) + \sigma(g(y_t) - f(x_t)), \quad y_{t+1} = g(y_t) - \sigma(g(y_t) - f(x_t)).$$

В текущей работе (см. (5)) используется первый вариант связи (связь по переменным). Таким образом, миграция между популяциями пропорциональна разнице между y_t и x_t с коэффициентом связи $\sigma > 0$: $\eta_t = \sigma(y_t - x_t)$. Параметр σ регулирует силу миграционного потока. Чтобы обеспечить неотрицательность y_t и x_t в системе (5), используется соответствующее усечение.

В работе изучается поведение системы в зависимости от σ в случае, когда первая изолированная подсистема находится в равновесном состоянии с $\mu_1 = 1$, а вторая изолированная подсистема — в хаотическом с $\mu_2 = 2,8$. С биологической точки зрения значительная разница

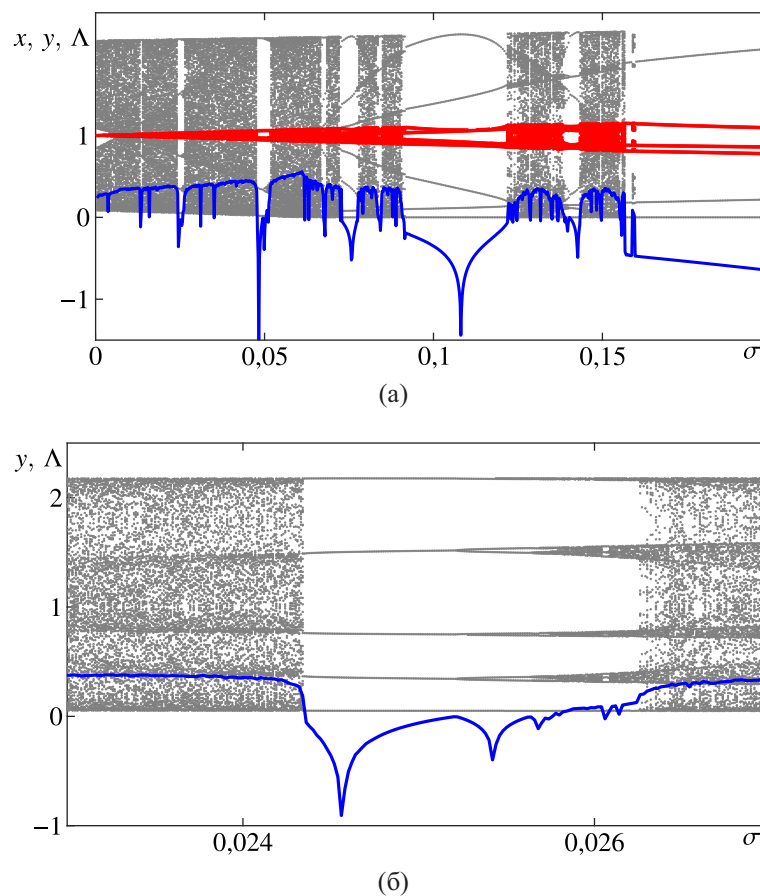


Рис. 2. Бифуркационная диаграмма для системы (5) при $\mu_1 = 1$ и $\mu_2 = 2,8$: а) $\sigma \in [0; 0,2]$; б) увеличенный фрагмент для $\sigma \in [0,023; 0,027]$

в репродуктивных потенциалах может быть обоснована по-разному. Например, в одинаковых экологических условиях, близких к идеальным, у обеих популяций $\mu = 2,8$. Однако у первой популяции на ее территории обитания условия выживания потомства крайне тяжелые, и в результате эффективное значение параметра роста оказывается существенно меньше, например $\mu = 1$. Ситуация, когда обе популяции имеют низкий результирующий репродуктивный потенциал, была изучена в работе [Belyaev, Bashkirtseva, Ryashko, 2021]. Основной интерес текущей работы заключается в том, чтобы исследовать случай, когда обе популяции имеют существенно отличный репродуктивный потенциал. Изменения динамических режимов в метапопуляционной модели (5) при изменении параметра σ представлены на рис. 2, а, где красным цветом изображены x -координаты аттракторов, а серым — y -координаты. Как видно, здесь наблюдается чередование периодических и хаотических режимов: существует большое окно порядка посередине, а затем в зоне $\sigma > 0,16$ устанавливается порядок в форме устойчивого 3-цикла. Зоны порядка и хаоса хорошо различаются по знаку старшего показателя Ляпунова, изображенного на рис. 2 синим цветом.

На рис. 2, б представлен увеличенный фрагмент бифуркационной диаграммы для $0,023 \leq \sigma \leq 0,027$. Здесь можно видеть, как в результате бифуркации кризиса появляется устойчивый 5-цикл, который после каскада бифуркаций удвоения периода вновь трансформируется в хаос.

На рис. 3 изображены примеры осцилляционных аттракторов системы (5) и соответствующих временных рядов для различных значений параметра σ : а), б) 5-цикл для $\sigma = 0,0246$; в), г) хаос для $\sigma = 0,027$; д), е) 3-цикл для $\sigma = 0,17$.

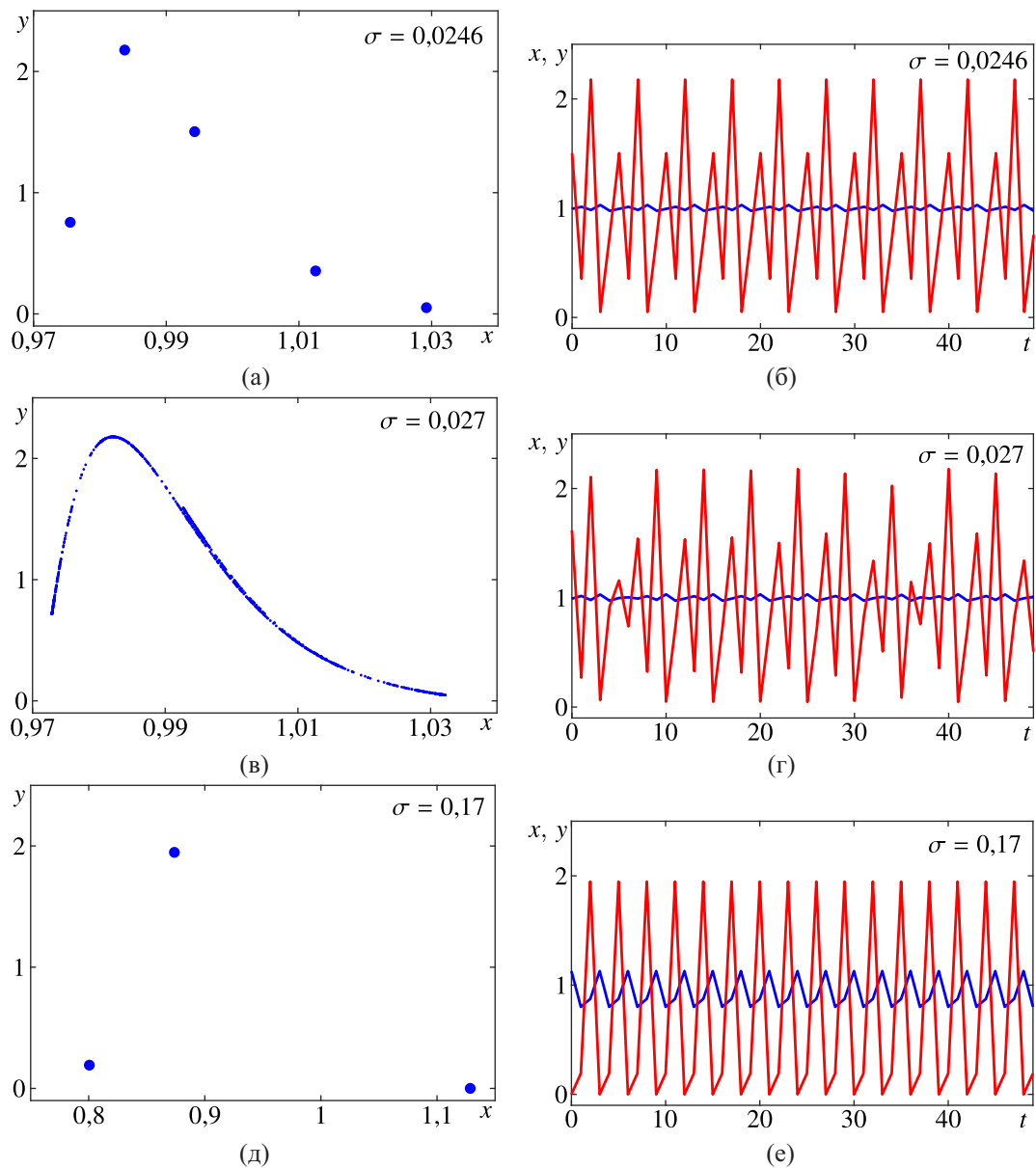


Рис. 3. Аттракторы и временные ряды решений системы (5) при $\mu_1 = 1$ и $\mu_2 = 2,8$: а), б) 5-цикл для $\sigma = 0,0246$; в), г) хаос для $\sigma = 0,027$; д), е) 3-цикл для $\sigma = 0,17$

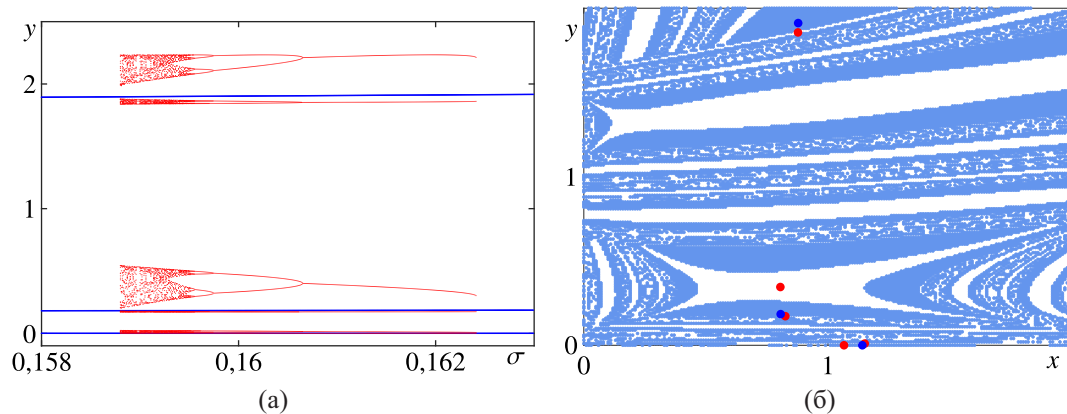


Рис. 4. Зоны бистабильности системы (5) при $\mu_1 = 1$ и $\mu_2 = 2,8$: а) бифуркационная диаграмма; б) бассейны притяжения для $\sigma = 0,162$

Отметим, что изолированная система (2) всегда моностабильна. Однако метапопуляционная система может быть и бистабильна. На рис. 4, *а* показан увеличенный фрагмент бифуркационной диаграммы, изображенной на рис. 2, который иллюстрирует бистабильный режим: синим изображен 3-цикл, а красным — сосуществующий аттрактор, имеющий разную форму. Эта бистабильность для $\sigma = 0,162$ представлена на рис. 4, *б* двумя бассейнами притяжения. Синими точками показан 3-цикл со своей областью притяжения (голубой), а красным цветом изображен 6-цикл с бассейном притяжения (белый).

Стохастическая динамика

В качестве стохастической модели рассматривается система (5), в которой миграции имеют вид $\eta_t = (\sigma + \varepsilon \xi_t)(y_t - x_t)$. Здесь исследуется случай, когда случайным возмущениям подвержен коэффициент связи σ , ξ_t — независимые гауссовские шумы интенсивности ε . Рассмотрим, как этот случайный шум в коэффициенте связи изменяет динамику системы.

На рис. 5 изображена бифуркационная диаграмма с показателями Ляпунова для $0,023 \leq \sigma \leq 0,027$ и разной интенсивности шума: $\varepsilon = 0$ (синий), $\varepsilon = 0,0002$ (красный), $\varepsilon = 0,0005$ (зеленый). Можно заметить, что с увеличением интенсивности шума зона порядка сужается и впоследствии исчезает, что подтверждается показателями Ляпунова. Так, например, при $\varepsilon = 0,0005$ стохастическая система на всем интервале $0,023 \leq \sigma \leq 0,027$ является хаотической.

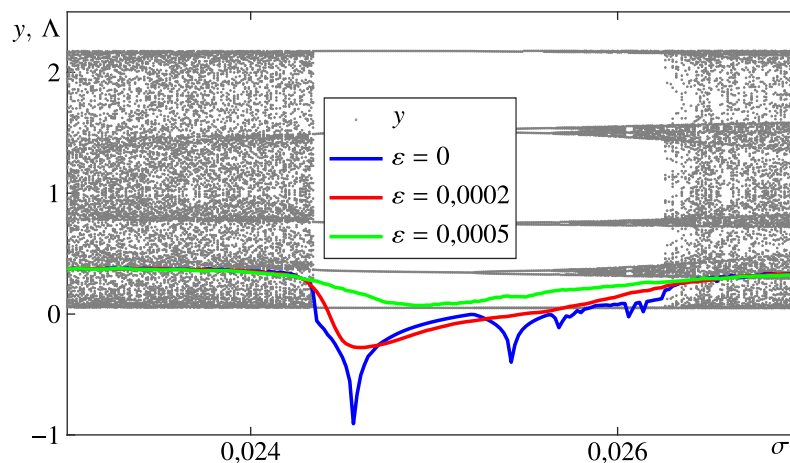


Рис. 5. Бифуркационная диаграмма для детерминированной системы (5) при $\mu_1 = 1$ и $\mu_2 = 2,8$ и показатели Ляпунова для различных значений интенсивности шума

Рассмотрим подробнее вызванную шумом стохастическую трансформацию 5-цикла в хаотический аттрактор. На рис. 6 для $\sigma = 0,0246$ представлена зависимость распределения точек аттрактора от интенсивности шума. Отчетливо видно, что при малых шумах случайные состояния концентрируются вблизи точек цикла. Однако когда интенсивность шума превосходит некоторое критическое значение, форма распределения случайных состояний резко меняется — начинаются переходы между состояниями цикла. Изменение формы распределения сопровождается переходом к хаосу, что подтверждается положительными значениями показателя Ляпунова, изображенного красным цветом на рис. 6, *б*.

Реакция детерминированного цикла на случайные возмущения может быть описана с помощью метода функции стохастической чувствительности [Bashkirtseva, Chen, Ryashko, 2010; Tsvetkov, Bashkirtseva, Ryashko, 2021]. В случае 5-цикла (например, для $\sigma = 0,0246$) эта функция представляет собой набор из пяти матриц W_i ($i = 1, \dots, 5$). Каждая матрица характеризует

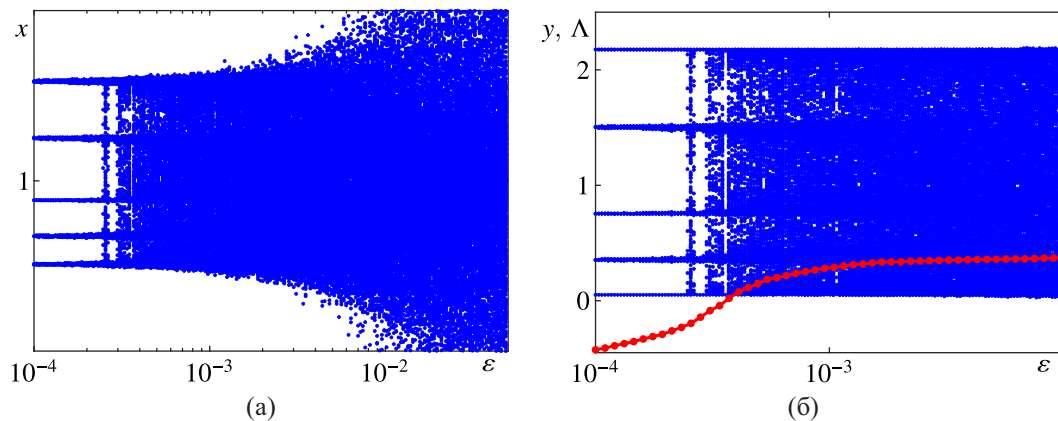


Рис. 6. Координаты состояний стохастической системы (5) при $\mu_1 = 1$ и $\mu_2 = 2,8$ для $\sigma = 0.0246$ (5-цикл) в зависимости от интенсивности шума. Старший показатель Ляпунова изображен красным цветом

чувствительность определенной точки 5-цикла к шуму. Алгоритм построения этих матриц представлен в [Bashkirtseva, Ryashko, Tsvetkov, 2010].

Для каждой матрицы W_i ($i = 1, \dots, 5$) можно найти собственные значения $m_{i,1}$, $m_{i,2}$ и соответствующие ортонормированные собственные векторы $u_{i,1}$, $u_{i,2}$. Эти собственные значения и векторы позволяют аппроксимировать дисперсию случайных состояний вокруг i -й точки детерминированного цикла в виде доверительного эллипса E_i :

$$\frac{z_1^2}{m_{i,1}} + \frac{z_2^2}{m_{i,2}} = -2\varepsilon^2 \ln(1 - \text{Pr}), \quad i = 1, \dots, 5. \quad (6)$$

Здесь z_1, z_2 — координаты эллипса E_i в базисе собственных векторов $u_{i,1}, u_{i,2}$ ($i = 1, \dots, 5$), а Pr — доверительная вероятность.

На рис. 7, а показаны фазовые траектории решений, стартующих с детерминированного 5-цикла. При малом значении интенсивности шума ($\varepsilon = 0,0001$) случайные состояния (красный цвет) локализируются вокруг точек 5-цикла. С увеличением интенсивности шума ($\varepsilon = 0,0004$) распределение случайных состояний (синий цвет) принимает качественно иную пространственную форму. Стоит отметить, что это стохастическое распределение очень похоже на детерминированный хаос (см. рис. 3, в), что объясняется особенностью данной модели. Что касается переходного процесса в детерминированной системе, здесь в зависимости от начальной точки возможны два сценария: решение имеет короткий переходный процесс к циклу либо достаточно долгий хаотический переходный процесс, достаточно далекий от точек цикла. Начальные состояния, отвечающие коротким переходным процессам, изображены на рис. 7, б синим цветом, а длинным переходным процессам — белым цветом. Видно, что синие точки вблизи состояния цикла формируют некоторую сплошную полосу (бассейн А). Вне этой полосы (бассейн Б) синие точки в любой сколь угодно малой окрестности соседствуют с белыми.

Действительно, при слабом шуме случайные состояния локализованы вблизи детерминированного цикла и не выходят из бассейна А. При увеличении шума дисперсия растет, и случайные решения попадают в бассейн Б, где с высокой вероятностью генерируются хаотические переходные процессы. Такой переход может быть аналитически описан с помощью метода доверительных эллипсов (6). На рис. 7, б изображены эллипсы для $\varepsilon = 0,0001$ (красный пунктир) и $\varepsilon = 0,0004$ (синий пунктир). Как видим, переход эллипса из бассейна А в бассейн Б может быть использован для оценки критического значения интенсивности шума, отвечающего переходу от порядка к хаосу.

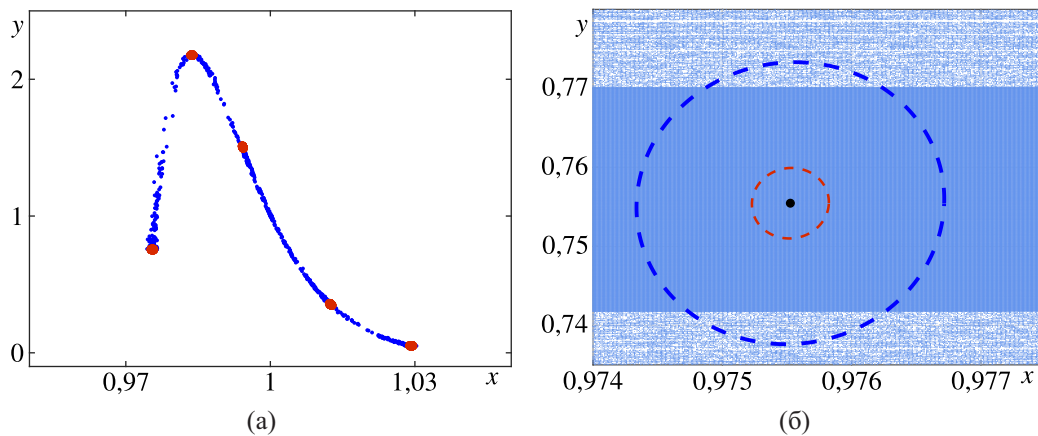


Рис. 7. Стохастические трансформации в системе (5) при $\mu_1 = 1$ и $\mu_2 = 2,8$ для $\sigma = 0,0246$: а) фазовые траектории решений для 5-цикла при $\varepsilon = 0,0001$ (красный) и $\varepsilon = 0,0004$ (синий); б) доверительные эллипсы при $\varepsilon = 0,0001$ (красный пунктир) и $\varepsilon = 0,0004$ (синий пунктир) для точки 5-цикла

Рассмотрим теперь влияние шума на поведение метапопуляционной системы в зоне $0,046 \leq \sigma \leq 0,054$. В этой зоне наблюдается окно порядка с устойчивым 3-циклом. Для этой зоны на рис. 8 показаны детали бифуркационной диаграммы с показателями Ляпунова для разной интенсивности шума: $\varepsilon = 0$ (синий цвет), $\varepsilon = 0,0002$ (красный цвет), $\varepsilon = 0,001$ (зеленый цвет). Здесь, аналогично случаю, рассмотренному на рис. 5, можно видеть, что с увеличением интенсивности шума зона порядка сужается и затем исчезает. В системе происходит переход от порядка к хаосу, что подтверждается показателем Ляпунова, например, для $\varepsilon = 0,001$. Как видим, здесь 3-цикл трансформируется в хаотический аттрактор при гораздо большем шуме, чем рассмотренный выше 5-цикл.

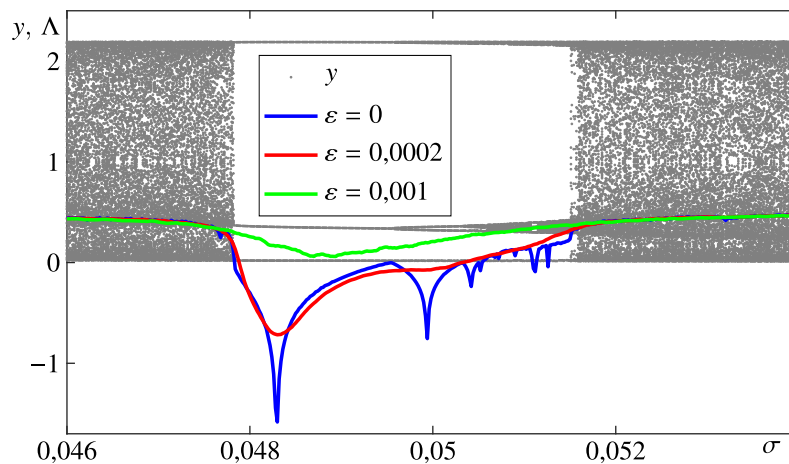


Рис. 8. Бифуркационная диаграмма для системы (5) при $\mu_1 = 1$ и $\mu_2 = 2,8$ с показателями Ляпунова

Проанализируем детали стохастической трансформации 3-цикла для $\sigma = 0,0483$ из окна порядка (рис. 8). На рис. 9 представлена зависимость распределения точек аттрактора от интенсивности шума. В данном случае также хорошо заметно, что с увеличением интенсивности шума происходит переход от 3-цикла к хаотическому аттрактору, что подтверждается показателем Ляпунова на рис. 9, б.

Теперь рассмотрим достаточно большую параметрическую зону $0,15 \leq \sigma \leq 0,51$, где регулярным аттрактором системы тоже является 3-цикл. На рис. 10 изображена бифуркационная

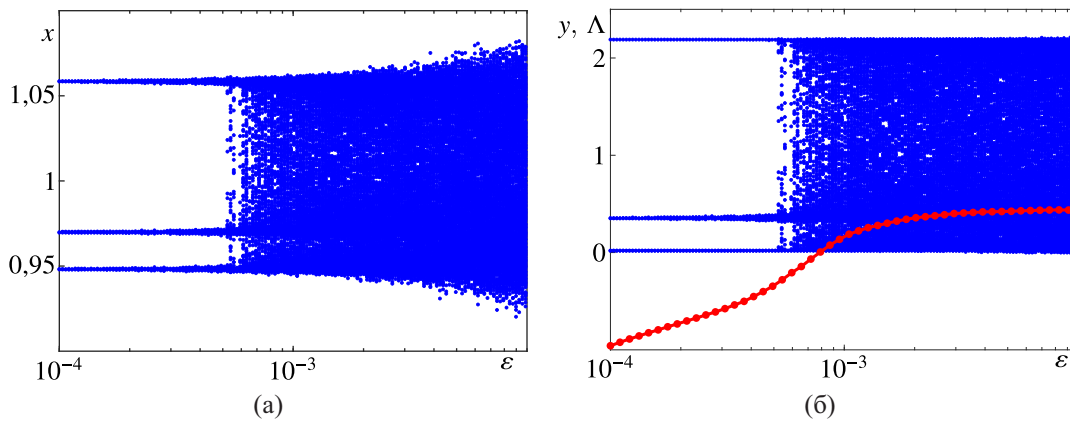


Рис. 9. Координаты случайных состояний системы (5) при $\mu_1 = 1$ и $\mu_2 = 2,8$ для $\sigma = 0,0483$ (3-цикл) в зависимости от интенсивности шума с показателем Ляпунова (красный)

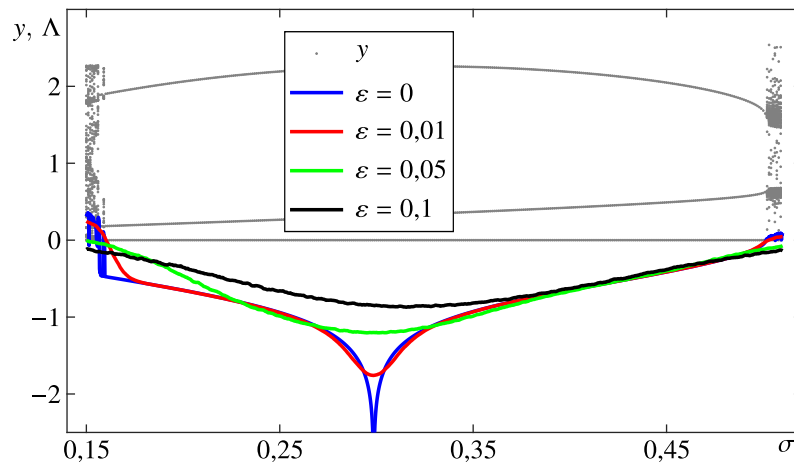


Рис. 10. Бифуркационная диаграмма для системы (5) при $\mu_1 = 1$ и $\mu_2 = 2,8$ с показателями Ляпунова

диаграмма с показателями Ляпунова для разной интенсивности шума: $\varepsilon = 0$ (синий цвет), $\varepsilon = 0,01$ (красный цвет), $\varepsilon = 0,05$ (зеленый цвет), $\varepsilon = 0,1$ (черный цвет). В отличие от случаев выше, эта зона 3-цикла устойчива к шуму и сохраняет режим порядка, что подтверждается показателями Ляпунова.

Исследуем влияние случайного шума на 3-циклы из зоны $0,15 \leq \sigma \leq 0,51$, а именно для $\sigma = 0,17$ (рис. 11, а, б) и для $\sigma = 0,45$ (рис. 11, в, г). На рис. 11 представлена зависимость распределения точек аттрактора от интенсивности шума. Отчетливо видно, что при увеличении интенсивности шума случайные состояния 3-цикла размываются и формируют случайное распределение. Как видим, здесь, в отличие от рассмотренных выше случаев, показатель Ляпунова при увеличении интенсивности шума остается отрицательным, то есть перехода к хаосу не происходит.

В качестве заключительного этапа исследования сравним поведение показателей Ляпунова (рис. 12) в зависимости от интенсивности шума для некоторых значений параметра σ , представляющих все три рассмотренные выше параметрические зоны порядка. Как видно на рис. 12, а, регулярные аттракторы из первой (рис. 5) и второй (рис. 8) параметрических зон чувствительны к внешнему воздействию и наблюдается переход от порядка к хаосу. В третьей же зоне (рис. 10), наоборот, при увеличении интенсивности шума порядок сохраняется (рис. 12, б). При этом показатель Ляпунова для 3-цикла при $\sigma = 0,17$ более чувствителен к изменению шума, чем при $\sigma = 0,45$.

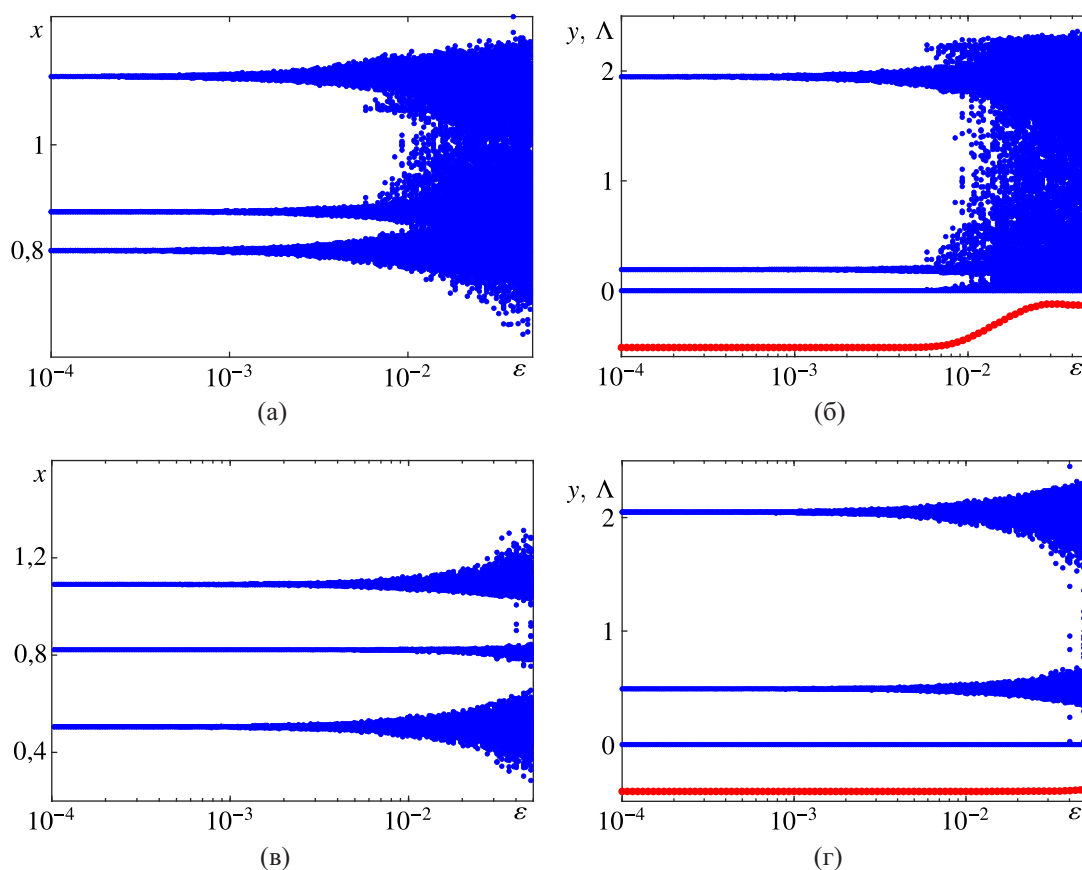


Рис. 11. Координаты случайных состояний системы (5) при $\mu_1 = 1$ и $\mu_2 = 2,8$ для 3-цикла с показателем Ляпунова (красный): а), б) $\sigma = 0,17$; в), г) $\sigma = 0,45$

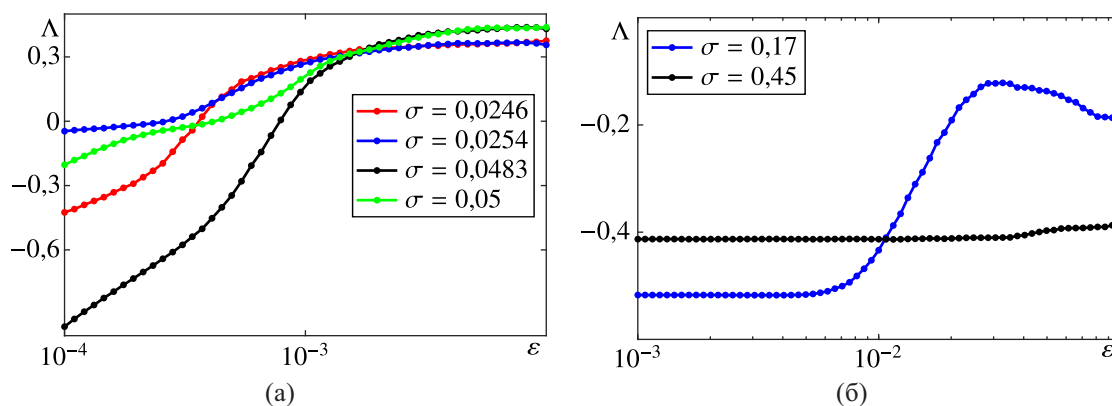


Рис. 12. Показатели Ляпунова системы (5) при $\mu_1 = 1$ и $\mu_2 = 2,8$ для разных значений параметра связи σ в зависимости от интенсивности шума

Заключение

В данной работе исследованы стохастические эффекты в двумерной метапопуляционной модели с миграцией. Каждая из подсистем моделируется отображением Рикера, при этом рассматривается случай, когда в условиях изоляции первая подсистема находится в равновесном режиме, а вторая — в хаотическом. Для детерминированной модели проведен бифуркационный

анализ и локализованы параметрические зоны периодических и хаотических режимов. Методами прямого численного моделирования с использованием показателей Ляпунова исследованы стохастические переходы от порядка к хаосу. В исследовании индуцированных шумом переходов продемонстрированы возможности аналитического подхода, основанного на технике функции стохастической чувствительности и методе доверительных областей. Проведен сравнительный анализ воздействия случайных возмущений на циклы для трех зон порядка. Выявлены условия, при которых происходит переход от периодического режима в хаотический. Показано, что для достаточно больших значений коэффициента связи 3-цикл, описывающий установившийся режим динамики метапопуляции, является устойчивым к шуму, сохраняя свойство порядка. С биологической точки зрения это может быть обосновано неоднородными условиями среды, когда две популяции имеют разный параметр естественного прироста, а также внутренним свойством системы.

Список литературы (References)

- Базыкин А. Д. Нелинейная динамика взаимодействующих популяций. — М.–Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2003.
Bazykin A. D. Nelineynaya dinamika vzaimodeystvuyushchikh populyatsiy [Nonlinear dynamics of interacting populations] // Moscow–Izhevsk: Institut kompyuternyh issledovaniy, 2003 (in Russian).
- Баширцева И. А., Ряшко Л. Б., Цветков И. Н. Стохастическая чувствительность равновесий и циклов одномерных дискретных отображений // Изв. вузов. Прикладная нелинейная динамика. — 2009. — Т. 17, № 6. — С. 74–85. — <https://doi.org/10.18500/0869-6632-2009-17-6-74-85>
Bashkirtseva I. A., Ryashko L. B., Tsvetkov I. N. Nelineynaya dinamika vzaimodeystvuyushchikh populyatsiy [Stochastic sensitivity of equilibrium and cycles for 1D discrete maps] // *Izvestiya VUZ. Applied Nonlinear Dynamics*. — 2009. — Vol. 17, No. 6. — P. 74–85 (in Russian).
- Беляев А. В., Первалова Т. В. Стохастическая чувствительность квазипериодических и хаотических аттракторов дискретной модели Лотки–Вольтерры // Известия Института математики и информатики Удмуртского государственного университета. — 2020. — Т. 55. — С. 19–32. — <https://doi.org/10.35634/2226-3594-2020-55-02>
Belyaev A. V., Perevalova T. V. Stokhasticheskaya chuvstvitel'nost' kvaziperiodicheskikh i khaoticheskikh attraktorov diskretnoi modeli Lotki–Vol'terry [Stochastic sensitivity of quasiperiodic and chaotic attractors of the discrete Lotka–Volterra model] // *Izvestiya Instituta matematiki i informatiki Udmurtskogo gosudarstvennogo universiteta*. — 2020. — Vol. 55. — P. 19–32 (in Russian).
- Жусубалиев Ж. Т., Яночкина О. О. Бифуркации двумерного тора в кусочно-гладких динамических системах // Изв. вузов. Прикладная нелинейная динамика. — 2009. — Т. 17, № 6. — С. 86–98. — <https://doi.org/10.18500/0869-6632-2009-17-6-86-98>
Zhusubaliev Z. T., Yanochkina O. O. Bifurkatsii dvumernogo tora v kusochno-gladkikh dinamicheskikh sistemakh [Bifurcations of a two-dimensional torus in piecewise-smooth dynamical systems] // *Izvestiya VUZ. Applied Nonlinear Dynamics*. — 2009. — Vol. 17, No 6. — P. 86–98 (in Russian).
- Кулаков М. П., Фрисман Е. Я. Синхронизация 2-циклов в системе симметрично связанных популяций, запас–пополнение в которых описывается функцией Рикера // Изв. вузов. Прикладная нелинейная динамика. — 2010. — Т. 18, № 6. — С. 25–41. — <https://doi.org/10.18500/0869-6632-2010-18-6-25-41>
Kulakov M. P., Frisman E. Ya. Sinkhronizatsiya 2-tsiklov v sisteme simmetrichno svyazannykh populyatsii, zapas–popolnenie v kotorykh opisyyaetsya funktsiei Rikera [Synchronizing the period-2 cycle in the system of symmetrical coupled populations with stock–recruitment based on the Ricker population model] // *Izvestiya VUZ. Applied Nonlinear Dynamics*. — 2010. — Vol. 18, No 6. — P. 25–41 (in Russian).
- Фрисман Е. Я., Кулаков М. П., Ревуцкая О. Л., Жданова О. Л., Неверова Г. П. Основные направления и обзор современного состояния исследований динамики структурированных и взаимодействующих популяций // Компьютерные исследования и моделирование. — 2019. — Т. 11, № 1. — С. 119–151. — <https://doi.org/10.20537/2076-7633-2019-11-1-119-151>
Frisman E. Ya., Kulakov M. P., Revutskaya O. L., Zhdanova O. L., Neverova G. P. Osnovnye napravleniya i obzor sovremennogo sostoyaniya issledovaniy dinamiki strukturirovannykh i vzaimodeystvuyushchikh populyatsii [The key approaches and review of current researches on dynamics of structured and interacting populations] // *Computer Research and Modeling*. — 2019. — Vol. 11, No 1. — P. 119–151 (in Russian).

- Alexandrov D. V., Bashkirtseva I. A., Crucifix M., Ryashko L. B.* Nonlinear climate dynamics: From deterministic behaviour to stochastic excitability and chaos // *Physics Reports*. — 2021. — Vol. 902. — P. 1–60. — <https://doi.org/10.1016/j.physrep.2020.11.002>
- Anishchenko V. S., Astakhov V. V., Neiman A. B., Vadivasova T. E., Schimansky-Geier L.* Nonlinear dynamics of chaotic and stochastic systems. Tutorial and modern development. — Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag, 2007. — <https://doi.org/10.1007/978-3-540-38168-6>
- Bashkirtseva I., Chen G., Ryashko L.* Analysis of stochastic cycles in the Chen system // *Int. J. Bifurcation and Chaos*. — 2010. — Vol. 20, No. 5. — P. 1439–1450. — <https://doi.org/10.1142/S0218127410026587>
- Bashkirtseva I., Ryashko L.* Chaotic transients, riddled basins, and stochastic transitions in coupled periodic logistic maps // *Chaos*. — 2021a. — Vol. 31. — P. 053101. — <https://doi.org/10.1063/5.0050613>
- Bashkirtseva I., Ryashko L.* Stochastic sensitivity analysis of noise-induced extinction in the Ricker model with delay and Allee effect // *Bulletin of Mathematical Biology*. — 2018. — Vol. 80, No. 6. — P. 1596–1614. — <https://doi.org/10.1007/s11538-018-0422-6>
- Bashkirtseva I., Ryashko L.* Stochastic sensitivity analysis of noise-induced phenomena in discrete systems // *Recent Trends in Chaotic, Nonlinear and Complex Dynamics*. — World Scientific Series on Nonlinear Science Series B. — 2021b. — Chap. 8. — P. 173–192.
- Bashkirtseva I., Ryashko L.* Stochastic sensitivity of regular and multi-band chaotic attractors in discrete systems with parametric noise // *Physics Letters A*. — 2017. — Vol. 381, No. 37. — P. 3203–3210. — <https://doi.org/10.1016/j.physleta.2017.08.017>
- Bashkirtseva I., Ryashko L., Pisarchik A. N.* Stochastic transitions between in-phase and anti-phase synchronization in coupled map-based neural oscillators // *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*. — 2021. — Vol. 95. — P. 105611. — <https://doi.org/10.1016/j.cnsns.2020.105611>
- Bashkirtseva I., Ryashko L., Tsvetkov I.* Sensitivity analysis of stochastic equilibria and cycles for the discrete dynamic systems // *Dyn. Contin. Discrete Impuls. Syst. Ser. A: Math. Anal.* — 2010. — Vol. 17. — P. 501–515.
- Belyaev A., Bashkirtseva I., Ryashko L.* Noise-induced transformations in a system of two coupled equilibrium and chaotic subpopulations // *International Journal of Bifurcation and Chaos*. — 2022. — Vol. 32, No. 14. — P. 2250220. — <https://doi.org/10.1142/S0218127422502200>
- Belyaev A., Bashkirtseva I., Ryashko L.* Stochastic variability of regular and chaotic dynamics in 2D metapopulation model // *Chaos, Solitons & Fractals*. — 2021. — Vol. 151. — P. 111270. — <https://doi.org/10.1016/j.chaos.2021.111270>
- Bjorkstedt E. P.* Ricker model // *Encyclopedia of theoretical ecology*. — Berkeley: University of California Press, 2012. — P. 632–636.
- Boccaletti S., Pisarchik A. N., del Genio C. I., Amann A.* Synchronization: from coupled systems to complex networks. — Cambridge: Cambridge University Press, 2018. — <https://doi.org/10.1017/9781107297111>
- Cross M., Greenside H.* Pattern formation and dynamics in nonequilibrium systems. — Cambridge: Cambridge University Press, 2009. — <https://doi.org/10.1017/CBO9780511627200>
- Greenman J. V., Benton T. G.* The impact of environmental fluctuations on structured discrete time population models: Resonance, synchrony and threshold behaviour // *Theoretical Population Biology*. — 2005. — Vol. 68, No. 4. — P. 217–235. — <https://doi.org/10.1016/j.tpb.2005.06.007>
- Hastings A.* Complex interactions between dispersal and dynamics: lessons from coupled logistic equations // *Ecology*. — 1993. — Vol. 74, No. 5. — P. 1362–1372. — <https://doi.org/10.2307/1940066>
- Horsthemke W., Lefever R.* Noise-induced transitions. — Berlin: Springer, 1984. — https://doi.org/10.1007/978-3-642-70196-2_23

- Kraut S., Feudel U. Multistability, noise, and attractor hopping: The crucial role of chaotic saddles // *Phys. Rev. E.* — 2002. — Vol. 66. — P. 015207. — <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.66.015207>
- Kuramoto Y., Battogtokh D. Coexistence of coherence and incoherence in nonlocally coupled phase oscillators // *Nonlinear Phenom. Complex Syst.* — 2002. — Vol. 5. — P. 380–385.
- Lande R., Engen S., Saether B.-E. Stochastic population dynamics in ecology and conservation. — Oxford: Oxford University Press, 2003. — <https://doi.org/10.1093/acprof:oso/9780198525257.001.0001>
- Lin W., Chen G. Using white noise to enhance synchronization of coupled chaotic systems // *Chaos.* — 2006. — Vol. 16. — P. 013134. — <https://doi.org/10.1063/1.2183734>
- Lloyd A.L. The coupled logistic map: a simple model for the effects of spatial heterogeneity on population dynamics // *Journal of Theoretical Biology.* — 1995. — Vol. 173, No. 3. — P. 217–230. — <https://doi.org/10.1006/jtbi.1995.0058>
- Maistrenko Yu. L., Maistrenko V. L., Popovich A., Mosekilde E. Transverse instability and riddled basins in a system of two coupled logistic maps // *Phys. Rev. E.* — 1998. — Vol. 57. — P. 2713–2724. — <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.57.2713>
- May R. Simple mathematical models with very complicated dynamics // *Nature.* — 1976. — Vol. 261. — P. 459–467. — <https://doi.org/10.1038/261459a0>
- Nicolis G., Prigogine I. Self-organization in nonequilibrium systems. — New York: Wiley, 1977.
- Panaggio M. J., Abrams D. M. Chimera states: coexistence of coherence and incoherence in networks of coupled oscillators // *Nonlinearity.* — 2015. — Vol. 28, No. 3. — P. R67–R87. — <https://doi.org/10.1088/0951-7715/28/3/R67>
- Pikovski A., Rosenblum M., Kurths J. Synchronization: a universal concept in nonlinear sciences. — Cambridge: Cambridge University Press, 2001. — <https://doi.org/10.1017/CBO9780511755743>
- Quinn T. J., Deriso R. B. Quantitative fish dynamics. — Oxford: Oxford University Press, 1999.
- Ricker W. E. Stock and recruitment // *J. Fish. Res. Board. Can.* — 1954. — Vol. 11. — P. 559–623. — <https://doi.org/10.1139/f54-039>
- Ryashko L. Sensitivity analysis of the noise-induced oscillatory multistability in Higgins model of glycolysis // *Chaos.* — 2018. — Vol. 28, No. 3. — P. 033602. — <https://doi.org/10.1063/1.4989982>
- Ryashko L., Belyaev A., Bashkirtseva I. Noise-induced switching in dynamics of oscillating populations coupled by migration // *Chaos.* — 2023. — Vol. 33, No. 6. — P. 063143. — <https://doi.org/10.1063/5.0153675>
- Rybalova E. V., Vadivasova T. E., Strelkova G. E., Zakharova A. Multiplexing noise induces synchronization in multilayer networks // *Chaos, Solitons & Fractals.* — 2022. — Vol. 163. — P. 112521. — <https://doi.org/10.1016/j.chaos.2022.112521>
- Sakaguchi H., Tomita K. Bifurcations of the coupled logistic map // *Progress of Theoretical Physics.* — 1987. — Vol. 78, No. 2. — P. 305–315. — <https://doi.org/10.1143/PTP.78.305>
- Sun Y., Zhao D. Effects of noise on the outer synchronization of two unidirectionally coupled complex dynamical networks // *Chaos.* — 2012. — Vol. 22. — P. 023131. — <https://doi.org/10.1063/1.4721997>
- Tanaka G., Sanjuán M. A. F., Aihara K. Crisis-induced intermittency in two coupled chaotic maps: Towards understanding chaotic itinerancy // *Phys. Rev. E.* — 2005. — Vol. 71. — P. 016219. — <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.71.016219>
- Tsvetkov I., Bashkirtseva I., Ryashko L. Stochastic transformations of multi-rhythmic dynamics and order–chaos transitions in a discrete 2D model // *Chaos.* — 2021. — Vol. 31, No. 6. — P. 063121. — <https://doi.org/10.1063/5.0054679>
- Zakharova A. Chimera patterns in complex networks. — Berlin: Springer, 2020. — <https://doi.org/10.1007/978-3-030-21714-3>
- Zhang Y., Nicolaou Z. G., Hart J. D., Roy R., Motter A. E. Critical switching in globally attractive chimeras // *Phys. Rev. X.* — 2020. — Vol. 10. — P. 011044. — <https://doi.org/10.1103/PhysRevX.10.011044>

УДК: 577.3

Актуальные проблемы компьютерного моделирования тромбоза, фибринолиза и тромболизиса

М. А. Пантелеев^{1,2,3,a}, Е. С. Бершадский^{1,4}, А. М. Шибeko^{1,3},
Д. Ю. Нечипуренко^{1,2,3}

¹Центр теоретических проблем физико-химической фармакологии РАН,
Россия, 109029, г. Москва, ул. Средняя Калитниковская, д. 30

²Физический факультет Московского государственного университета им. М. В. Ломоносова,
Россия, 119991, г. Москва, Ленинские Горы, д. 1, корп. 2

³Национальный медицинский исследовательский центр детской гематологии, онкологии и иммунологии
им. Д. Рогачева,

Россия, 117997, г. Москва, ул. Саморы Машела, д. 1

⁴Институт биохимической физики им. Н. М. Эмануэля Российской академии наук (ИБХФ РАН),
Россия, 119334, г. Москва, ул. Косыгина, д. 4

E-mail: ^a mapanteleev@yandex.ru

Получено 02.12.2023, после доработки — 20.05.2024.

Принято к публикации 28.05.2024.

Система гемостаза представляет собой одну из ключевых защитных систем организма, которая присутствует практически во всех его жидких тканях, но наиболее важна в крови. Она активируется при различных повреждениях стенки сосуда, и взаимодействие ее специализированных клеток и гуморальных систем приводит сначала к формированию гемостатического сгустка, останавливающего потерю крови, а затем к постепенному растворению этого сгустка. Образование гемостатического тромба — уникальный с точки зрения физиологии процесс, так как за время порядка минуты система гемостаза образует сложные структуры, имеющие пространственный масштаб от микрометров (в случае повреждения микрососудов или стыков между отдельными эндотелиальными клетками) до сантиметра (в случае повреждения крупных магистральных артерий). Гемостатический ответ зависит от множества скоординированных и параллельно идущих процессов, включающих адгезию тромбоцитов, их активацию, агрегацию, секрецию фибриновой сети в результате работы каскада свертывания крови. Компьютерное моделирование представляет собой мощный инструмент для исследования этой сложной системы и решения практических задач в этой области на разных уровнях организации: от внутриклеточной сигнализации в тромбоцитах, моделирования гуморальных систем свертывания крови и фибринолиза и до разработки многомасштабных моделей тромбообразования. Проблемы, связанные с компьютерным моделированием биологических процессов, можно разделить на две основные категории: отсутствие адекватного физико-математического описания имеющихся в литературе экспериментальных данных из-за сложности биологических систем (проблема отсутствия адекватной теоретической модели биологических процессов) и проблема высокой вычислительной сложности некоторых моделей, которая не позволяет применять их для исследования физиологически интересных сценариев. Здесь мы рассмотрим как некоторые принципиальные проблемы в области моделирования свертывания крови, которые до сих пор остаются нерешенными, так и прогресс в экспериментальных исследованиях гемостаза и тромбоза, ведущий к пересмотру многих ранее принятых представлений, что необходимо отразить в новых компьютерных моделях этих процессов. Особое внимание будет уделено нюансам артериального, венозного и микрососудистого тромбоза, а также проблемам фибринолиза и тромболизиса. В обзоре также кратко обсуждаются основные типы используемых математических моделей, их сложность с точки зрения вычислений, а также принципиальные вопросы, связанные с возможностью описания процессов тромбообразования в артериях.

Ключевые слова: гемостаз, тромбоз, компьютерное моделирование, фибринолиз, тромболизис, тромбоциты, тромбин, каскад свертывания

Работа поддержана грантом РФФ 23-44-00082.

© 2024 Михаил Александрович Пантелеев, Ефим Сергеевич Бершадский, Алексей Михайлович Шибeko, Дмитрий Юрьевич Нечипуренко

Статья доступна по лицензии Creative Commons Attribution-NoDerivs 3.0 Unported License.
Чтобы получить текст лицензии, посетите веб-сайт <http://creativecommons.org/licenses/by-nd/3.0/>
или отправьте письмо в Creative Commons, PO Box 1866, Mountain View, CA 94042, USA.

UDC: 577.3

Current issues in computational modeling of thrombosis, fibrinolysis, and thrombolysis

M. A. Pantelev^{1,2,3,a}, E. S. Bershadsky^{1,4}, A. M. Shibeko^{1,3},
D. Yu. Nechipurenko^{1,2,3}

¹Center for Theoretical Problems of Physico-chemical Pharmacology, Russian Academy of Sciences,
30 Srednyaya Kalitnikovskaya st., Moscow, 109029, Russia

²Faculty of Physics, Lomonosov Moscow State University,
1/2 Leninskiye Gory, Moscow, 119991, Russia

³Dmitry Rogachev National Medical Research Centre of Pediatric Hematology, Oncology and Immunology,
1 Samory Mashela st., Moscow, 117997, Russia

⁴N. M. Emanuel Institute of Biochemical Physics of Russian Academy of Sciences,
4 Kosygina st., Moscow, 119334, Russia

E-mail: ^a mapantelev@yandex.ru

Received 02.12.2023, after completion — 20.05.2024.

Accepted for publication 28.05.2024.

Hemostasis system is one of the key body's defense systems, which is presented in all the liquid tissues and especially important in blood. Hemostatic response is triggered as a result of the vessel injury. The interaction between specialized cells and humoral systems leads to the formation of the initial hemostatic clot, which stops bleeding. After that the slow process of clot dissolution occurs. The formation of hemostatic plug is a unique physiological process, because during several minutes the hemostatic system generates complex structures on a scale ranging from microns for microvessel injury or damaged endothelial cell-cell contacts, to centimeters for damaged systemic arteries. Hemostatic response depends on the numerous coordinated processes, which include platelet adhesion and aggregation, granule secretion, platelet shape change, modification of the chemical composition of the lipid bilayer, clot contraction, and formation of the fibrin mesh due to activation of blood coagulation cascade. Computer modeling is a powerful tool, which is used to study this complex system at different levels of organization. This includes study of intracellular signaling in platelets, modelling humoral systems of blood coagulation and fibrinolysis, and development of the multiscale models of thrombus growth. There are two key issues of the computer modeling in biology: absence of the adequate physico-mathematical description of the existing experimental data due to the complexity of the biological processes, and high computational complexity of the models, which doesn't allow to use them to test physiologically relevant scenarios. Here we discuss some key unresolved problems in the field, as well as the current progress in experimental research of hemostasis and thrombosis. New findings lead to reevaluation of the existing concepts and development of the novel computer models. We focus on the arterial thrombosis, venous thrombosis, thrombosis in microcirculation and the problems of fibrinolysis and thrombolysis. We also briefly discuss basic types of the existing mathematical models, their computational complexity, and principal issues in simulation of thrombus growth in arteries.

Keywords: hemostasis, thrombosis, computational modeling, fibrinolysis, thrombolysis, platelets, thrombin, coagulation cascade

Citation: *Computer Research and Modeling*, 2024, vol. 16, no. 4, pp. 975–995 (Russian).

The work was supported by a grant from the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation 075-15-2021-950.

Введение

Система гемостаза представляет собой одну из жизненно необходимых защитных систем многоклеточных организмов. Она отвечает за остановку кровотечений при ранениях, а также активно вовлечена в управление проницаемостью сосудистой стенки, ангиогенез, регенерацию повреждений и защиту от патогенов [Kaiser, Escaig, Nicolai, 2023]. С другой стороны, нарушения системы гемостаза играют центральную роль в патофизиологии многочисленных заболеваний и состояний, включая инфаркты, инсульты, сепсис, травмы, онкологические заболевания и многие другие. Система гемостаза включает в себя несколько ключевых звеньев: тромбоциты (или клеточное звено), свертывание крови и фибринолиз (плазменное звено). Несмотря на то что система гемостаза в первую очередь важна для крови, многие компоненты этой системы присутствуют практически во всех биологических жидкостях человека — от слез и лимфы до спинномозговой жидкости, за исключением разве что желудочного сока.

Несмотря на десятилетия исследований, современные научные представления не позволяют дать на ответы на многие важные вопросы, связанные с пространственно-временной динамикой гемостатического ответа в норме и при многочисленных патологиях. Высокая сложность системы гемостаза сделала применение математических моделей важным инструментом для ее исследования, начиная с пионерских работ 1960-х годов [Levine, 1966]. Так как подавляющее большинство соответствующих математических моделей являются крайне сложными с точки зрения возможности получения аналитических решений, в данном обзоре мы будем применять термин «компьютерные модели», подразумевая при этом широкий класс математических моделей, которые анализируются при помощи численных методов на компьютерах. В настоящее время для решения разнообразных задач в данной области применяются разнообразные компьютерные модели, основная функция которых состоит в прояснении представлений, исследовании различных гипотез и генерировании новых идей о ключевых механизмах соответствующих процессов. Некоторые из фундаментальных и прикладных аспектов моделирования гемостаза освещены в недавних обзорах [Nechipurenko et al., 2020; Panteleev et al., 2007; Shibeko, Panteleev, 2016; Sveshnikova et al., 2016; Gutierrez, Mukherjee, Bark, 2023; Anand, Panteleev, Ataullakhanov, 2022; Belyaev et al., 2018]. По причине существования этих работ мы в настоящем обзоре не будем стремиться к детальному историческому или систематическому описанию предыдущих моделей, а сосредоточимся на проблемных аспектах в области. С одной стороны, какие-то из вопросов моделирования за десятилетия работы так и не были разрешены. С другой стороны, из-за быстрого развития экспериментальных подходов и появления новых данных модели достаточно быстро теряют свою актуальность или же требуют существенного пересмотра, развития и уточнения. Цель данного обзора — отразить наиболее значимые и актуальные проблемы в моделировании процессов, связанных со свертыванием крови и лизисом сгустков.

В начале обзора дается краткое общее описание устройства системы гемостаза, после чего рассматриваются основные сценарии тромбоза и гемостаза и, наконец, ключевые актуальные проблемы, связанные с моделированием тромбообразования и тромболизиса.

Система гемостаза

Одним из первых и наиболее важных для выживания физиологических ответов на внутренние и внешние повреждения организма является гемостатический ответ, реализующийся благодаря системе гемостаза. Данная система в норме обеспечивает быструю и надежную остановку кровопотери в случае проникающих сосудистых повреждений путем формирования так называемых гемостатических пробок (рис. 1). Основным строительным материалом для образования таких пробок являются тромбоциты — небольшие клеточные фрагменты, циркулирующие в кровотоке вблизи сосудистых стенок. Тромбоциты обладают уникальной способностью быстро

му, сокращать, выбрасывать несколько типов гранул, а также экспонировать отрицательно заряженные молекулы фосфатидилсерина на внешнюю сторону плазматической мембраны, тем самым влияя на реакции каскада свертывания, о которых пойдет речь дальше [Podoplelova et al., 2021].

Другим важнейшим участником гемостатического ответа является каскад свертывания крови, который реализуется благодаря многочисленным биохимическим реакциям, происходящим в плазме крови и на поверхности различных клеток (рис. 1, б). Он представляет собой сеть протеолитических реакций, в которой ферменты активируют друг друга посредством частичного протеолиза [Panteleev, Dashkevich, Ataullakhanov, 2015]. Важным событием в реакциях плазменного звена свертывания является наработка тромбина — центрального фермента каскада, который осуществляет превращение растворимого фибриногена в нерастворимый полимеризующийся фибрин. Фибриновые волокна стабилизируют первичный гемостатический агрегат из тромбоцитов, выполняя роль прочного связующего компонента для клеток и структур внеклеточного матрикса. Тромбин также способствует необратимой активации тромбоцитов за счет взаимодействия с так называемыми PAR-рецепторами, а также служит важным медиатором реакций воспаления — в первую очередь за счет активации схожих PAR-рецепторов на поверхности эндотелия и лейкоцитов.

Внутриклеточная сигнализация тромбоцитов представляет собой большую сеть реакций, сложность которой превышает сложность свертывания крови (рис. 1, в). Тромбоциты располагают большим арсеналом рецепторов, которые управляют ответом на адгезионные взаимодействия и растворимые активаторы, а также ингибиторы. Системы ферментов и вторичных мессенджеров внутри клетки фильтруют эти сигналы, учитывают их взаимодействие и вырабатывают совокупность динамических функциональных ответов в зависимости от концентрации и комбинации агонистов [Sveshnikova et al., 2016; Martyanov et al., 2020a; Martyanov et al., 2020b; Shakhidzhanov et al., 2015; Sveshnikova, Ataullakhanov, Panteleev, 2015].

Сценарии гемостаза и тромбоза

Ответ системы гемостаза на повреждение зависит не только от ее состояния, но и от тяжести сосудистой травмы (рис. 2). В норме обеспечивается образование неокклюзивного тромба в случае повреждений I типа — непроникающих повреждений, не приводящих к вскрытию просвета сосуда. В случае повреждений II типа, приводящих к появлению раневого просвета в стенке сосуда, нормальный ответ системы гемостаза подразумевает формирование гемостатического тромба, не влияющего на кровоток в сосудах, но останавливающего потерю крови. В случае повреждений III типа — полного рассечения сосуда — в норме формируется окклюзивный тромб, закрывающий просвет сосуда в области ранения и останавливающий кровопотерю. Механизмы, обуславливающие такую гибкость системы гемостаза, не до конца изучены, и для их выяснения необходимо создание новых подходов, как экспериментальных, так и теоретических.

В силу большой клинической значимости особое внимание в современных теоретических и экспериментальных моделях тромбообразования уделено двум основным сценариям: непроникающему повреждению сосудистой стенки в условиях высоких скоростей сдвига (так как подобная ситуация имеет место в случае артериального тромбоза [Panteleev et al., 2021; Receveur et al., 2020]) и непроникающему повреждению вены в условиях минимальных или нулевых скоростей сдвига (что соответствует венозному тромбозу [Lehmann et al., 2018]). В первом случае основу тромба составляют тромбоциты, в то время как во втором случае формируется так называемый красный тромб, по большей части состоящий из запутавшихся в фибриновой сети эритроцитов. Надо отметить, что, хотя венозный тромб физически непосредственно создается фибриновой сетью, регуляция формирования этой сети, по современным представлениям, полностью определяется взаимной активацией тромбоцитов и нейтрофилов [von Brühl et al., 2012; Brill et al., 2012].

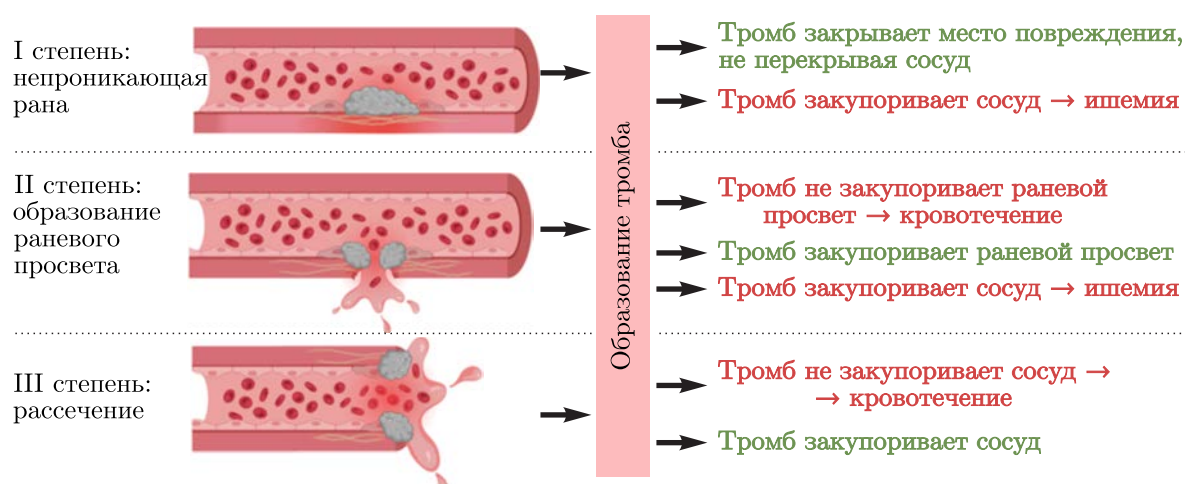


Рис. 2. Основные сценарии гемостатического ответа при повреждении сосуда. Зеленым цветом обозначены физиологически оптимальные ответы системы, красным цветом — нежелательные

Таким образом, оба сценария связаны с тромбозом — образованием крупного внутрисосудистого сгустка, который может нарушить кровоток в сосуде. В связи с этим ключевыми вопросами, ответ на которые помогают найти модели тромбообразования, являются вопросы о механизмах, ограничивающих рост тромба, а также вопросы механической и биохимической стабильности тромбов [Belyaev et al., 2018; Masalceva et al., 2022; Kaneva et al., 2021; Tosenberger et al., 2016; Tosenberger et al., 2013; Bershadsky et al., 2024].

Однако важно понимать, что многочисленные сценарии работы системы гемостаза не исчерпываются этим. Минимальный список сценариев, которые представляют интерес и требуют разработки компьютерных моделей (и для которых сейчас модели крайне мало развиты), также включает в себя:

- 1) собственно гемостаз — формирование сгустка в ране с проколом или разрывом сосуда [Stalker et al., 2013; Tomaiuolo et al., 2014; Yakusheva et al., 2022];
- 2) специальные ситуации тромбоза — системное внутрисосудистое свертывание, тромбоз аневризмы [Mountrakis, Lorenz, Hoekstra, 2013], тромбирование протезов в клапанах сердца [Zhang et al., 2023], образование тромбов в полостях сердца в случае фибрилляции предсердий [Qureshi et al., 2023; Qureshi et al., 2020];
- 3) естественный фибринолиз тромбов и гемостатических сгустков, а также тромболизис сгустков при тромболитической терапии [Shibeko et al., 2020; Zhalyalov et al., 2017];
- 4) математические модели лабораторных диагностических тестов гемостаза, прежде всего агрегации тромбоцитов [Garzon Dasgupta et al., 2020], генерации тромбина [Panteleev, Andreeva, Lobanov, 2020; Mitrophanov et al., 2020; Ratto et al., 2020; Panteleev et al., 2010] и тромбодинамики [Panteleev, Dashkevich, Ataulakhanov, 2015; Parunov et al., 2011].

Поскольку свертывание крови представляет собой химический процесс, то основой его моделирования является использование дифференциальных уравнений, основанных на законах химической и ферментативной кинетики [Anand, Panteleev, Ataulakhanov, 2022; Panteleev et al., 2006]. В том случае, когда рассматривается распространение свертывания в пространстве, то уравнения в частных производных дополнительно используют законы диффузии и конвекции,

в комбинации (в случае потока крови) с уравнениями Навье – Стокса или иным вариантом описания текущей крови или плазмы. Альтернативные способы отображения реакций свертывания, моделирование на основе стохастических уравнений или частиц, используются достаточно редко для специальных задач. Внутриклеточная сигнализация [Shakhidzhanov et al., 2015; Sveshnikova et al., 2016] и метаболизм [Shepelyuk, Panteleev, Sveshnikova, 2016] тромбоцита также в подавляющем большинстве случаев описываются обыкновенными дифференциальными уравнениями.

Напротив, возможность тромбоцита находиться в нескольких состояниях и его сложная механика делают математические модели на основе частиц распространенными при моделировании динамики тромбообразования в условиях потока. Однако ограничения вычислительных возможностей и потребность в анализе ведут также к развитию непрерывных вариантов представления роста тромбоцитарного тромба [Babushkina et al., 2015; Lobanov, Starozhilova, 2006].

Одной из простейших непрерывных моделей стационарного проницаемого тромба является модель [Tomaiuolo et al., 2014], которая описывает гетерогенный тромб как среду, состоящую из двух однородных компартментов (соответствующих ядру и оболочке тромба), со своими значениями пористости и проницаемости. Для расчета потоков крови в модели решаются уравнения Бринкмана внутри тромба и уравнения Стокса в сосуде. С этими уравнениями сопряжены уравнения конвекции – диффузии – реакции, которые позволяют рассчитывать локальные концентрации активаторов тромбоцитов (тромбина и АДФ). Другая предложенная непрерывная модель формирования тромба описывает динамику тромбообразования при использовании уравнения типа конвекции – диффузии – реакции (в том числе для локальных концентраций тромбоцитов) [Du et al., 2020] и учитывает взаимодействие тромбоцитов посредством фактора Виллебранда и интегринов, а также активацию тромбоцитов в ответ на АДФ и механическое воздействие потока крови на тромб. Такого рода модели имеют относительно небольшую вычислительную сложность и могут в будущем позволить анализировать тромбы, растущие в крупных сосудах (например, тромбы, вырастающие на атеросклеротической бляшке в коронарных артериях человека).

Для описания динамики жидкости в моделях формирования тромба, помимо классических подходов [Masalceva et al., 2022], также активно применяется формализм частиц, который органично сочетается с описанием динамики тромбоцитов и эритроцитов, например метод гладких частиц (smooth particles hydrodynamics) [Al-Saad et al., 2020] и метод диссипативной динамики частиц (dissipative particle dynamics) [Tosenberger et al., 2013]. Также в таких задачах иногда применяются методы решеточного уравнения Больцмана (Lattice Boltzman) [Shankar et al., 2022], которые органично сочетаются с решеточными кинетическими моделями Монте-Карло (Lattice kinetic Monte Carlo, LKMC), используемыми для описания динамики клеток в жидкости.

Проблемы предыдущих моделей

Формирование гемостатической пробки включает множество процессов различного масштаба, что существенным образом усложняет компьютерное моделирование гемостаза. В силу того, что регуляция каждого из этих процессов по отдельности плохо понятна, их оказывается не так просто реализовать в составе крупной модели. В результате практически ни одна из современных моделей гемостаза или его части не отражает их корректно.

Один из наиболее ярких примеров — мембранные реакции свертывания. Большинство ключевых реакций этой системы являются поверхностно-зависимыми и происходит на отрицательно заряженных фосфолипидных поверхностях [Podoplelova et al., 2021]. Часть реакций происходят в объеме плазмы, однако в случае их протекания внутри тромбоцитарного агрегата необходимо учитывать множество процессов, связанных с обменом молекулами между двумя фазами — объемной и поверхностной. Основным источником прокоагулянтной поверхности являются активированные тромбоциты, причем лишь часть тромбоцитов при активации переходит

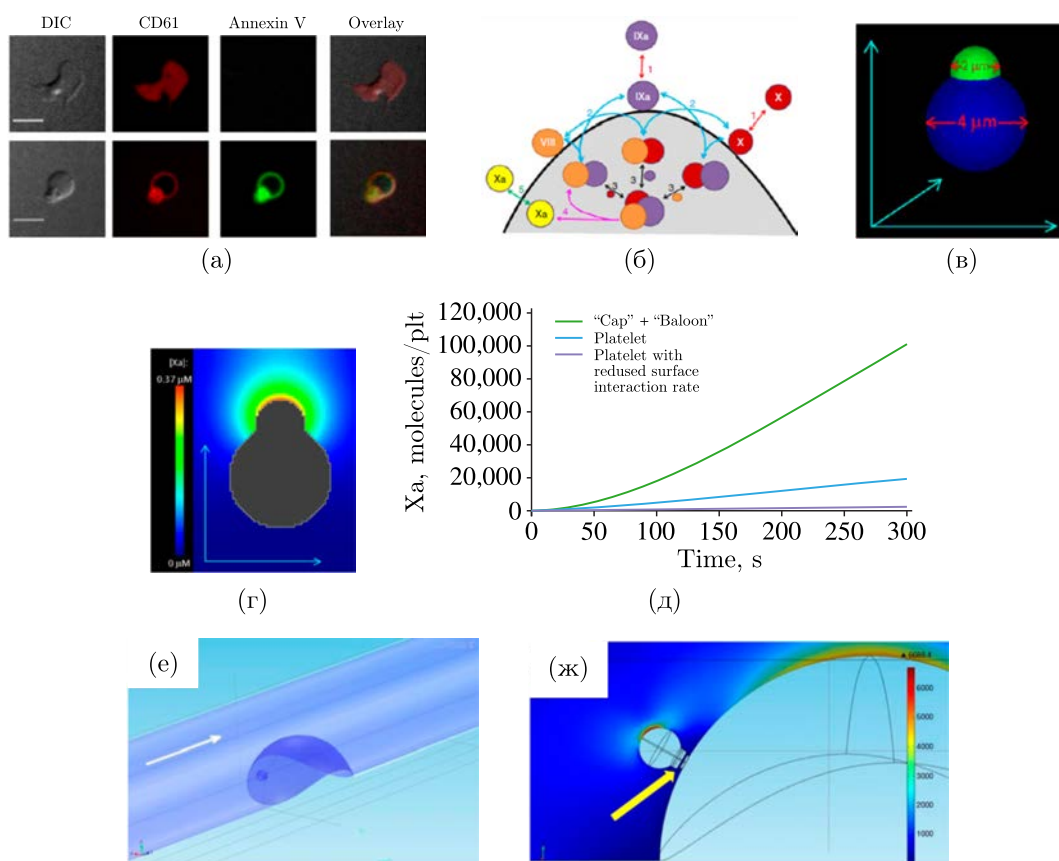


Рис. 3. Некоторые из проблем мембранных реакций свертывания: использование компьютерных моделей. а) Только часть тромбоцитов при активации связывает факторы свертывания, причем связывание идет преимущественно на части поверхности — «шапке». б) Схема реакций внутренней теназы в компьютерной модели. в) Пространственная организация реакции в модели. г) Пространственная генерация фактора свертывания Xa в модели. д) Вклады «шапки» и «основного тела». е) Геометрическая схема компьютерной модели гемодинамики в районе тромба с прокоагулянтным тромбоцитом. ж) Распределение скоростей сдвига. Адаптировано из [Podoplelova et al., 2016a]

в прокоагулянтное состояние [Sveshnikova, Ataullakhanov, Panteleev, 2015; Panteleev et al., 2005; Topalov et al., 2012].

Буквально считанные математические модели — в тесте генерации тромбина [Susree, Panteleev, Anand, 2018] или тромбодинамике [Panteleev et al., 2006] — учитывают этот критический феномен. Еще более впечатляет [Podoplelova et al., 2016a], что лишь часть поверхности этих тромбоцитов хорошо связывает факторы свертывания (рис. 3, а). Мы разработали математическую модель, в которой учли все этапы активации фактора X на поверхности разных частей тромбоцита (рис. 3, б, в), и показали, что концентрация факторов на «шапке» на порядки ускоряет реакции (рис. 3, г, д). Кроме того, математическое моделирование показало вторую возможную значимость «шапки»: поскольку именно она отвечает за связывание тромбоцита с артериальным тромбом [Abaeva et al., 2013], в этой примыкающей к тромбу области создается регион пониженных скоростей сдвига, позволяющих прохождение процессов свертывания (рис. 3, е, ж). Как было показано ранее, также с помощью математического моделирования, свертывание крови сильно ингибируется артериальными потоками [Tosenberger et al., 2016; Shibeko et al., 2010]. Возможно, однако, что мультимеризация белков свертывания на поверхности мембраны позволяет им избежать уноса потоком: этот механизм также был обнаружен путем анализа экспериментальных данных с помощью математического моделирования [Podoplelova et al., 2016b].

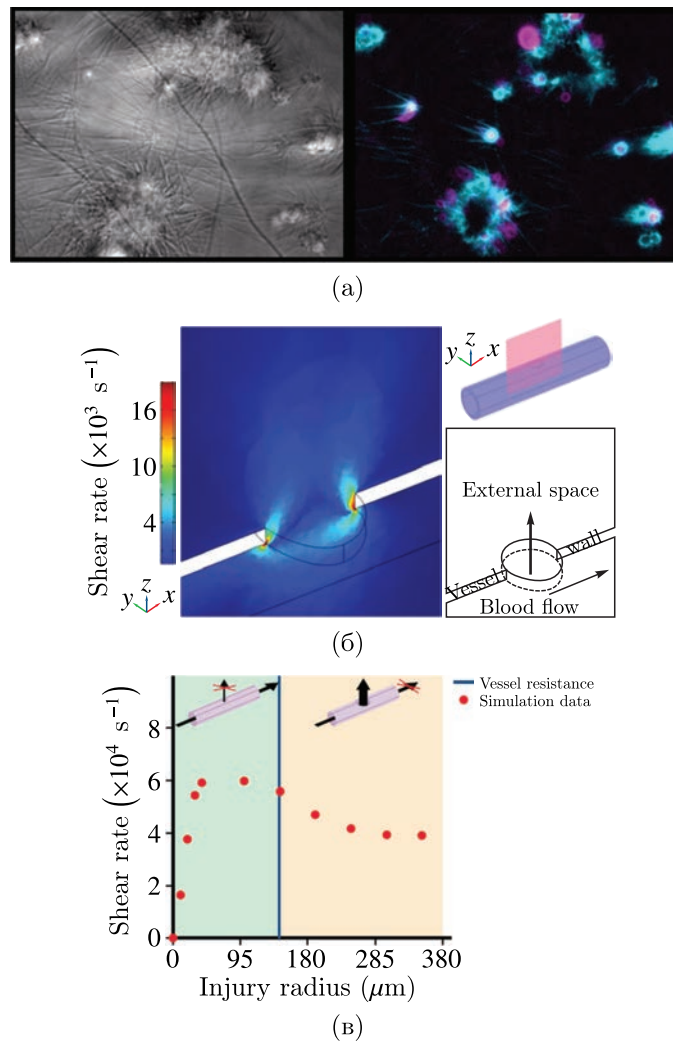


Рис. 4. Загадки на уровне тромбообразования. а) Неравномерное распределение прокоагулянтных тромбоцитов и фибрина в тромбе. Изображения тромбов, образовавшихся в микрофлюидной камере при прокачивании рекальцифицированной цельной крови через фибриллярный коллаген первого типа и тканевый фактор. Микрофотографии получены при помощи метода дифференциально-интерференционного контраста (слева), а также в двух каналах флуоресценции (справа). На левой микрофотографии видны два тромбоцитарных тромба, а также сеть фибриновых волокон в основании (толстые темные нити относятся к фибриллам коллагена). На правой микрофотографии та же самая область проточной камеры отснята в каналах флуоресценции: на поверхности агрегатов видны области, богатые фибриногеном (голубой цвет), а также прокоагулянтные тромбоциты (фиолетовый цвет). б) Распределение скоростей сдвига при травматическом проколе сосуда [Yakusheva et al., 2022]. в) Немонотонная зависимость скорости сдвига на границе раны от радиуса раны связана с тем, что при малых ранах поток через рану управляется сопротивлением раны, а при больших — сопротивлением подводящих сосудов [Podoplelova et al., 2016a]

Пространственное распределение прокоагулянтных тромбоцитов в тромбе крайне неоднородно и может изменяться с течением времени. Образование и перераспределение прокоагулянтных тромбоцитов в результате сильной активации могут существенным образом влиять на пространственное распределение наработки тромбина: мы ранее показали феномен вытеснения этих тромбоцитов на периферию артериального тромба вследствие контракции (рис. 4, а), что приводит к появлению повышенной концентрации фибрина в периферической части тромба [Nechipurenko et al., 2019]. Интересно, что в «венозных» тромбах также наблюдается уплот-

нение фибрина на периферии вследствие контракции, однако механизм иной: математическая модель контракции указывает на то, что сближение периферических тромбоцитов (и связанного с ними фибрина) происходит вследствие асимметричности сил, действующих на них около границы [Kovalenko et al., 2021].

Кроме загадки мембранных реакций к традиционным проблемам, связанным с физико-химическим описанием гемостатического ответа, можно отнести полимеризацию фибрина, которая инициируется появлением мономеров фибрина — яркий пример многомасштабного и многостадийного процесса, при котором из наноразмерных объектов могут появляться сложные микроскопические структуры. Данный процесс обладает большой чувствительностью к величине потока [Shibeko et al., 2010]. В настоящее время, как и для мембранных реакций свертывания, есть специализированные математические модели этого процесса [Weisel, Nagaswami, 1992; Андреева, Николаев, Лобанов, 2017], но предстоит большая работа по их инкорпорации в многомасштабные модели различных сценариев тромбообразования: сейчас есть лишь отдельные работы на эту тему [Xu et al., 2012; Tosenberger et al., 2016]. Детальный обзор подходов к компьютерному моделированию полимеризации фибрина можно найти в недавнем обзоре [Nelson et al., 2021]. Среди подходов к полимеризации фибрина можно выделить биохимическое моделирование [Pancaldi et al., 2022], статистические подходы [Moiseyev, Givli, Bar-Yoseph, 2013], рассмотрение полимеризации как волны фазового перехода [Лобанов, 2016], методы диссипативной динамики частиц [Yesudasan, Wang, Averett, 2018b], подходы молекулярной динамики [Yesudasan, Wang, Averett, 2018a].

Моделирование фибринолиза и тромболизиса (процесса, обратного свертыванию) сталкивается с несколько другими вызовами. Запросы на моделирование фибринолиза хотя бы *in vitro* возникли еще в 1960-е годы [Liniger, Rueggsegger, 1967], и это кинетическое и стохастическое моделирование продолжает развиваться до сих пор в разных вариантах [LaCroix, 2012; Bannish, Keener, Fogelson, 2014; LeCover et al., 2019], но мало выходит за пределы пробирки. Если процесс гемостаза нам примерно понятен, то регуляция естественного фибринолиза является крайне загадочной: мы до сих пор плохо понимаем, откуда берутся активаторы фибринолиза и как их производство регулируется параллельно с заживлением раны. Скорее всего, компьютерное моделирование фибринолиза *in vivo* невозможно в отрыве от моделирования заживления раны и каскада протеиназ внеклеточного матрикса. Напротив, компьютерное моделирование тромболизиса (процесса, когда в плазму крови вводят экзогенный активатор) является активно развиваемым направлением. Первые механизменные модели этого процесса были разработаны коллективом Скотта Даймонда [Anand, Diamond, 1996]. В настоящее время продолжают работы, посвященные как фундаментальному исследованию регуляции тромболизиса [Shibeko et al., 2020; Petkantchin et al., 2023], так и клиническим применениям [Piebalgs et al., 2018; Lahr et al., 2013]. Обзор по этой тематике можно найти в [Bannish et al., 2017].

Новые проблемы последнего десятилетия

За последнее десятилетие экспериментальных исследований тромбоза и гемостаза был накоплен большой объем данных, которые не только существенно развили представления о механизмах разнообразных процессов, но и позволили сформулировать ряд вопросов, для ответа на которые необходимо применять широкий арсенал новых подходов, в том числе компьютерного моделирования.

Так, недавно было показано, что в ряде случаев начальные этапы образования гемостатических тромбов при проколе сосуда (рис. 4, б) происходят в условиях экстремально больших скоростей сдвига, которые раньше относили к патологическим [Yakusheva et al., 2022]. При этом в большинстве случаев реалистичного повреждения контролирующим этапом является сопротивление сосудов, подходящих к ране, а не самой раны (рис. 4, в). Эти данные свидетельствуют

о том, что адекватное моделирование гемостатического ответа должно учитывать широкий круг биомеханических процессов, связанных с взаимодействием фактора фон Виллебранда с поврежденной сосудистой стенкой и тромбоцитами, и, возможно, процессы биомеханической активации тромбоцитов. Таким образом, анализ конформационной динамики и процессов активации фактора фон Виллебранда в условиях высокоградиентных течений крови приобретает новый смысл в контексте именно гемостаза.

Гемостатические сгустки и пристеночные тромбы обладают существенной пространственной неоднородностью. Первые намеки на это существовали уже к концу 2000-х годов [Katoska et al., 2010], но решающим прорывом считается цикл работы из лаборатории Лоренса Брасса, которые с 2013 года сформулировали концепцию ядра и оболочки для артериальных тромбов и гемостатических сгустков при проколе сосуда. Обнаружение сильной пространственной гетерогенности пристеночных тромбов в микро- и макроциркуляции [Stalker et al., 2013; Marar et al., 2022; Welsh et al., 2017] диктует необходимость не только учета данного явления в соответствующих моделях, но и важность поиска физико-химических механизмов такой гетерогенности. Наблюдаемая гетерогенность, по всей видимости, вызвана совокупностью взаимовлияющих эффектов, адекватное описание которых на сегодняшний день представляет серьезный вызов для компьютерных моделей:

- 1) изначальной гетерогенностью распределения важных активаторов гемостатического ответа при повреждении (в первую очередь коллагена и тканевого фактора), а также фосфолипидов, способных резко ускорять соответствующие реакции плазменного звена свертывания [Nechipurenko et al., 2019; Mangin et al., 2020];
- 2) сильной зависимостью реакций как плазменного, так и тромбоцитарного звена гемостаза от потока крови [Shibeko et al., 2010; Mangin et al., 2020];
- 3) ярко выраженным нелинейным характером зависимости функционального ответа тромбоцитов от концентрации различных активаторов, в первую очередь тромбина, тромбоксана А2 и АДФ [Sveshnikova et al., 2016; Shakhidzhanov et al., 2015; Masalceva et al., 2022; Obyednyy et al., 2016; Свешникова, Степанян, Пантелеев, 2022; Болдова, Василевская, Свешникова, 2023];
- 4) способностью тромбоцитов к выбросу разнообразных гранул, изменению формы и конформации; данные функциональные ответы могут сильно влиять не только на соседние тромбоциты, но и на процессы транспорта веществ в тромбе: локальные параметры упаковки тромбоцитов в тромбе определяют как скорости конвекционного транспорта, так и скорость диффузии молекул-участников [Tomaiuolo et al., 2014];
- 5) внешняя часть растущего тромба обладает рядом особенностей: в связи с низким уровнем активации тромбоцитов и минимальной активностью тромбина данная область тромба, которую часто называют оболочкой (англ. “shell”), обладает высокой подвижностью; динамичность внешних слоев тромба в условиях потока может существенно влиять на его размер, однако адекватное описание физики взаимодействия потока с такой динамичной структурой требует использования соответствующих вычислительно сложных моделей [Masalceva et al., 2022; Kaneva et al., 2021; Ahmed et al., 2020; Trifanov et al., 2018].

Одним из возможных механизмов, ограничивающих распространение процесса сильной активации тромбоцитов во внешние области тромба, является потенциально высокая эффективность конвекционного транспорта веществ в оболочке тромба за счет ее высокой пористости. Данный эффект может иметь еще большее значение в контексте образования гемостатической пробки, где большой перепад давлений между сосудистым руслом и внешней частью раневого

просвета может приводить к резкому увеличению потоков крови [Yakusheva et al., 2022], в том числе потоков плазмы через формирующуюся первичную пробку. Другим механизмом может быть сам снос первичной оболочки (защищающей свертывание от потока) и стабилизация оставшегося участка ингибирующим свертывание действием потока [Kaneva et al., 2021; Tosenberger et al., 2016; Tosenberger et al., 2013].

Моделирование транспорта веществ в артериальном тромбе или гемостатической пробке, помимо сложности адекватного описания течения на границе между кровью и проницаемым для плазмы тромбом [Lobanov, Starozhilova, 2006], также сталкивается с наличием большой неопределенности в проницаемости различных областей тромба. Имеющиеся в литературе данные указывают на колоссальный разброс в измерениях проницаемости тромбов в зависимости от условий проведения эксперимента [Du et al., 2020]. Представленные в литературе значения проницаемости различаются на шесть порядков, что, по-видимому, отражает большое разнообразие реализующихся структур. В случае богатых фибрином плотных тромбов значения могут составлять порядка 10^{-6} – $10^{-2} \mu^2$, в то время как рыхлые тромбоцитарные агрегаты, образующиеся в условиях высоких скоростей сдвига (с низкой степенью контракции и без фибрина), по всей видимости, обладают проницаемостью $0,1$ – $10 \mu^2$ [Du et al., 2020]. Учитывая существенное влияние потока на разнообразные процессы при тромбообразовании, а также сильную гетерогенность тромбов *in vivo*, крайне актуальной становится задача построения адекватной теоретической зависимости локальной проницаемости как от пористости артериального тромба (на которую главным образом влияет степень активации тромбоцитов), так и от концентрации фибрина. И та и другая величина существенным образом зависят от локальной активности тромбина.

Важным направлением современных исследований в области гемостаза является изучение особенностей молекулярных процессов, происходящих на так называемых скаффолдах — двумерных и трехмерных матрицах, обеспечивающих специальные условия протекания разнообразных реакций [Пантелеев и др., 2022]. Среди основных таких скаффолдов можно выделить обогащенные фосфатидилсерином фосфолипидные мембраны (на них происходят ключевые реакции свертывания крови), комплекс фибрина и белков внеклеточного матрикса (служит матрицей про- и антифибринолитических процессов) и, наконец, полимеры фосфатов, включая тромбоцитарные полифосфаты и внеклеточные ловушки нейтрофилов (участвуют в большом количестве процессов, в том числе в контактной активации свертывания крови).

Другими примерами новых проблем, которые высветились в ходе экспериментальных и теоретических работ последних лет и для которых практически отсутствуют компьютерные модели:

- 1) ДНК-ловушки нейтрофилов и контактный путь в венозном тромбообразовании [Brill et al., 2012];
- 2) гетерогенный лизис сгустков (рис. 5), содержащих не только фибрин [Staessens et al., 2020; Staessens et al., 2021];
- 3) металлопротеиназы матрикса как развитие фибринолиза;
- 4) метаболизм тромбоцитов и его влияние на функциональность [Shepelyuk, Panteleev, Sveshnikova, 2016];
- 5) проблемы кровоизлияний и миграции тромбоцитов в стыки между эндотелием [Kaiser, Escaig, Nicolai, 2023].

Несмотря на длительную историю моделирования свертывания крови и тромбоцитарного гемостаза (и во многом благодаря ей), мы сегодня находимся в стадии решительного пересмотра базовых представлений об этих процессах и, соответственно, компьютерных моделей. Можно

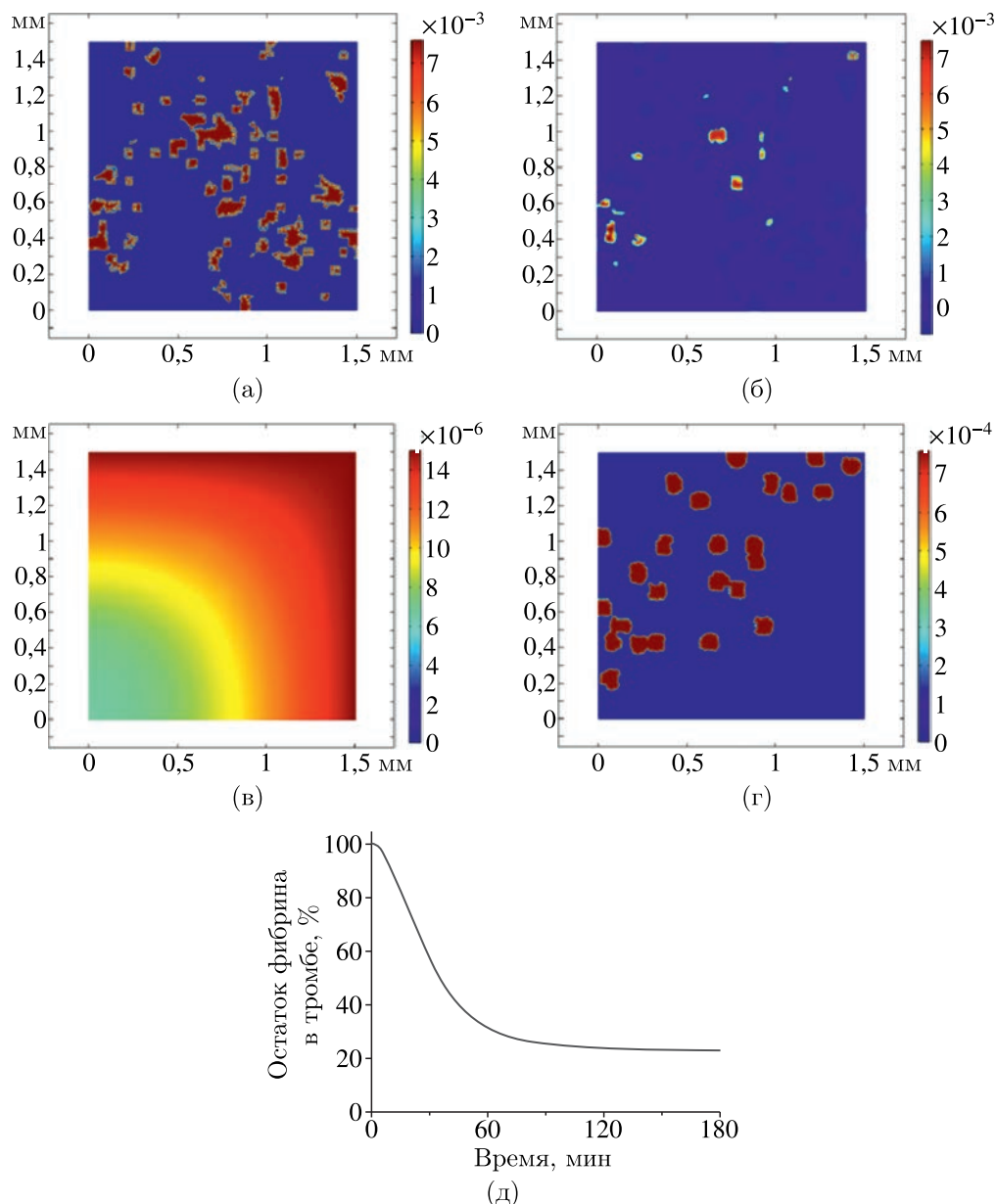


Рис. 5. Растворение фибрина в гетерогенном тромбе, богатом тромбоцитами и фактором фон Виллебранда (эритроциты — 10 %, фибрин — 20 %, тромбоциты — 70 %, фактор фон Виллебранда — 60 %, лейкоциты — 20 %, ДНК — 10 %), под действием ТПА. Расчет выполнен с помощью модифицированной модели из [Shibeko et al., 2020]. а) Начальное распределение фибрина в тромбе. б) Распределение фибрина в тромбе через 180 минут лизиса. в) Распределение ТПА в тромбе через 180 минут лизиса. г) Распределение ДНК в тромбе. д) Кинетика растворения фибрина в тромбе

ожидать, что в ближайшее время появятся новые поколения моделей, открывающие путь к новому пониманию.

Наряду с необходимостью расширения существующих моделей в связи с новыми экспериментальными данными исследователи сталкиваются и с другими проблемами: в первую очередь с необходимостью разработки новых физико-математических подходов к описанию сложных биологических процессов. В качестве примеров можно привести следующие нерешенные проблемы: адекватное описание внутриклеточных биохимических каскадов, где отдельная молекула

фермента может иметь более десятка сайтов фосфорилирования (и, следовательно, находится более чем в 1000 возможных состояний); проблема адекватного описания мембранных реакций в случае высокой концентрации молекул-участников (где из-за так называемого эффекта краудинга перестает хорошо работать закон действующих масс); проблема редукции детальных моделей свертывания крови для возможности описания процессов в пространственно неоднородных ситуациях и при наличии потока; создание континуальных моделей артериального тромба, учитывающих как пластичность внешних слоев тромба, так и возможность отрыва отдельных кусков (то есть эмболизацию).

Другой важной проблемой является вычислительная сложность многих детальных моделей тромбообразования, которая не позволяет использовать их для описания интересных с точки зрения физиологии сценариев. В качестве примеров можно привести модели микрососудистого тромбообразования с разрешением в отдельный тромбоцит [Masalceva et al., 2022; Kaneva et al., 2021; Tosenberger et al., 2016; Tosenberger et al., 2013], которые даже с применением мощнейших современных суперкомпьютеров не могут быть использованы для исследования тромбообразования в крупных артериях. В связи с этим возникает задача создания адекватных континуальных моделей, что также сопряжено с существенными техническими сложностями, описанными выше. Аналогичная ситуация имеет место при попытке переноса детальных моделей каскада свертывания [Panteleev et al., 2005] в условия пространственно неоднородных задач с потоком, что диктует необходимость создания редуцированных моделей свертывания крови.

Другим примером процесса, который на сегодняшний день крайне сложно исследовать при помощи компьютерного моделирования в силу технических сложностей, является образование красных тромбов в полостях сердца при фибрилляции предсердий: большой пространственный масштаб данной задачи, а также необходимость учета подвижных границ приводят к крайне высокой вычислительной сложности моделей даже в случае упрощенного описания реакций свертывания крови [Qureshi et al., 2023; Qureshi et al., 2020].

При решении широкого круга пространственно неоднородных нестационарных задач, связанных с описанием потока крови и реакций свертывания крови, которые зачастую формулируются в виде задач типа «реакция – диффузия – конвекция», возникают технические сложности, связанные с применяемыми численными подходами. Так, например, наш опыт моделирования в пакете программ Comsol Multiphysics показал, что при расчетах профилей концентрации факторов свертывания и активаторов тромбоцитов (таких как тромбин и АДФ) в условиях потока зачастую возникают большие технические трудности, связанные с расчетами на однородной стационарной расчетной сетке. При использовании относительно грубых сеток точность численного решения оказывается слишком низкой, а использование мелких сеток сопряжено со значительным увеличением времени расчета (которое обычно растет как минимум пропорционально числу узлов расчетной сетки). Для решения данной проблемы сегодня активно применяются так называемые адаптивные сетки. Адаптивная сетка [Berger, Oliger, 1984] — неоднородная сетка, в которой расстояние между узлами зависит от локальных значений рассчитываемых величин и их градиентов, — позволяет совместить адекватную точность расчетов и относительно небольшое число элементов сетки, а значит, вычислительную сложность задачи.

С точки зрения используемых подходов моделирование роста пристеночного тромба в условиях потока, пожалуй, является примером задачи, в которой зачастую сочетается самый внушительный арсенал методов: в случае высокого пространственного разрешения задачи необходимость описывать динамику отдельных клеток в структуре тромба во многих моделях приводит к различным математическим формализмам, используемым для описания жидкой фазы (крови или плазмы крови) и твердых частиц (тромбоцитов). В данном обзоре мы не касаемся нюансов такого описания, но хотели бы подчеркнуть, что на сегодняшний день каждая из опубликованных моделей роста тромба является фактически уникальным способом описания

тромбообразования, зачастую сочетающим множество различных подходов. Такая ситуация, увы, не позволяет провести какого-то адекватного сравнения этих моделей, так как в подавляющем большинстве случаев они являются уникальным продуктом отдельных лабораторий, зачастую использующих свой программный код, который далеко не всегда представлен в открытом доступе. В этом смысле, к сожалению, данная область исследований в целом находится на более низкой ступени развития, если сравнивать ее, например, с традиционным молекулярным моделированием, для которого сегодня существует несколько широко используемых и валидированных программных решений и четких протоколов, позволяющих говорить о принципиальной воспроизводимости получаемых результатов.

Благодарности

Авторы выражают благодарность А. А. Масальцевой за помощь в оформлении рисунков.

Список литературы (References)

- Андреева А. А., Николаев А. В., Лобанов А. И. Исследование точечной математической модели полимеризации фибрина // Компьютерные исследования и моделирование. — 2017. — Т. 9, № 2. — С. 247–258.
Andreeva A. A., Nikolaev A. V., Lobanov A. I. Issledovanie tochechnoi matematicheskoi modeli polimerizatsii fibrina [Analysis of point model of fibrin polymerization] // Computer Research and Modeling. — 2017. — Vol. 9, No. 2. — P. 247–258 (in Russian).
- Болдова А. Е., Василевская В. Д., Свешникова А. Н. Математическая модель рецептора 3 типа к инозитол-3-фосфату (IP_3R_3) // Системная биология и физиология. — 2023. — Т. 2, № 1. — С. 3–10.
Boldova A. E., Vasilevskaya V. D., Sveshnikova A. N. Matematicheskaya model' receptora 3 tipa k inozitol-3-fosfatu (IP_3R_3) // Sistemnaya biologiya i fiziologiya. — 2023. — Vol. 2, No. 1. — P. 3–10 (in Russian).
- Лобанов А. И. Полимеризация фибрина как волна фазового перехода. Математическая модель // Журнал вычислительной математики и математической физики. — 2016. — Т. 56, № 6. — С. 1138–1148.
Lobanov A. I. Fibrin polymerization as a phase transition wave: A mathematical model // Comput. Math. and Math. Phys. — 2016. — Vol. 56. — P. 1118–1127. (Original Russian paper: Lobanov A. I. Polimerizatsiya fibrina kak volna fazovogo perexoda. Matematicheskaya model' // Zhurnal vychislitel'noj matematiki i matematicheskoy fiziki. — 2016. — Vol. 56, No. 6. — P. 1138–1148.)
- Пантелеев М. А., Степанян М. Г., Свешникова А. Н. Функциональные ответы тромбоцитов и внутриклеточная сигнализация: молекулярные связи. Часть 1: ответы // Системная биология и физиология. — 2022. — Т. 1, № 3. — С. 14–23.
Panteleev M. A., Stepanyan M. G., Sveshnikova A. N. Funktsional'nye otvety trombocitov i vnutrikletchnaya signalizatsiya: molekulyarnye svyazi. Chast' 1: otvety // Sistemnaya biologiya i fiziologiya. — 2022. — Vol. 1, No. 3. — P. 14–23 (in Russian).
- Пантелеев М. А., Шибеко А. М., Нечипуренко Д. Ю., Береснева Е. А., Подоплелова Н. А., Свешникова А. Н. Гемостаз и тромбоз. Пространственная организация биохимических процессов на микроуровне // Биологические мембраны. — 2022. — Т. 39, № 3. — С. 163–171. — DOI: 10.31857/S0233475522030094
Panteleev M. A., Shibeko A. M., Nechipurenko D. Yu., Beresneva E. A., Podoplelova N. A., Sveshnikova A. N. Gemostaz i tromboz. Prostranstvennaya organizatsiya biohimicheskikh processov na mikrourovne [Hemostasis and thrombosis. Spatial organization of the biochemical processes at microscale] // Biologicheskie membrany. — 2022. — Vol. 39, No. 3. — P. 163–171 (in Russian).
- Свешникова А. Н., Степанян М. Г., Пантелеев М. А. Функциональные ответы тромбоцитов и внутриклеточная сигнализация: молекулярные связи. Часть 1: ответы // Системная биология и физиология. — 2022. — Т. 1, № 1. — С. 14–23.
Sveshnikova A. N., Stepanyan M. G., Panteleev M. A. Funktsional'nye otvety trombocitov i vnutrikletchnaya signalizatsiya: molekulyarnye svyazi. Chast' 1: otvety // Sistemnaya biologiya i fiziologiya. — 2022. — Vol. 1, No. 1. — P. 14–23 (in Russian).

- Abaeva A.A., Canault M., Kotova Y.N., Obydenny S.I., Yakimenko A.O., Podoplelova N.A., Panteleev M.A. et al.* Procoagulant platelets form an α -granule protein-covered “cap” on their surface that promotes their attachment to aggregates // *Journal of Biological Chemistry*. — 2013. — Vol. 288, No. 41. — P. 29621–29632.
- Ahmed M.U., Kaneva V., Loyau S., Nechipurenko D., Receveur N., Le Bris M., Mangin P.H. et al.* Pharmacological blockade of glycoprotein VI promotes thrombus disaggregation in the absence of thrombin // *Arteriosclerosis, thrombosis, and vascular biology*. — 2020. — Vol. 40, No. 9. — P. 2127–2142.
- Al-Saad M., Suarez C.A., Obeidat A., Bordas S.P.A., Kulasegaram S.* Application of smooth particle hydrodynamics method for modelling blood flow with thrombus formation // *Computer Modeling in Engineering & Sciences*. — 2020. — Vol. 122, No. 3. — P. 831–862.
- Anand S., Diamond S.L.* Computer simulation of systemic circulation and clot lysis dynamics during thrombolytic therapy that accounts for inner clot transport and reaction // *Circulation*. — 1996. — Vol. 94, No. 4. — P. 763–774.
- Anand M., Panteleev M.A., Ataullakhanov F.I.* Computational models of hemostasis: Degrees of complexity // *Applications in Engineering Science*. — 2022. — Vol. 10. — P. 100103.
- Babushkina E.S., Bessonov N.M., Ataullakhanov F.I., Panteleev M.A.* Continuous modeling of arterial platelet thrombus formation using a spatial adsorption equation // *PloS one*. — 2015. — Vol. 10, No. 10. — P. e0141068.
- Bannish B.E., Chernysh I.N., Keener J.P., Fogelson A.L., Weisel J.W.* Molecular and physical mechanisms of fibrinolysis and thrombolysis from mathematical modeling and experiments // *Scientific reports*. — 2017. — Vol. 7, No. 1. — P. 6914.
- Bannish B.E., Keener J.P., Fogelson A.L.* Modelling fibrinolysis: a 3D stochastic multiscale model // *Mathematical medicine and biology: a journal of the IMA*. — 2014. — Vol. 31, No. 1. — P. 17–44.
- Belyaev A.V., Dunster J.L., Gibbins J.M., Panteleev M.A., Volpert V.* Modeling thrombosis in silico: Frontiers, challenges, unresolved problems and milestones // *Physics of life reviews*. — 2018. — Vol. 26. — P. 57–95.
- Berger M.J., Oliger J.* Adaptive mesh refinement for hyperbolic partial differential equations // *Journal of computational Physics*. — 1984. — Vol. 53, No. 3. — P. 484–512.
- Bershadsky E.S., Ermokhin D.A., Kurattsev V.A., Panteleev M.A., Nechipurenko D. Yu.* Force balance ratio is a robust predictor of arterial thrombus stability // *Biophysical Journal*. — 2024.
- Brill A., Fuchs T.A., Savchenko A.S., Thomas G.M., Martinod K., De Meyer S.F., Wagner D. et al.* Neutrophil extracellular traps promote deep vein thrombosis in mice // *Journal of Thrombosis and Haemostasis*. — 2012. — Vol. 10, No. 1. — P. 136–144.
- von Brühl M.L., Stark K., Steinhart A., Chandraratne S., Konrad I., Lorenz M., Massberg S. et al.* Monocytes, neutrophils, and platelets cooperate to initiate and propagate venous thrombosis in mice in vivo // *Journal of Experimental Medicine*. — 2012. — Vol. 209, No. 4. — P. 819–835.
- Du J., Kim D., Alhawael G., Ku D.N., Fogelson A.L.* Clot permeability, agonist transport, and platelet binding kinetics in arterial thrombosis // *Biophysical journal*. — 2020. — Vol. 119, No. 10. — P. 2102–2115.
- Garzon Dasgupta A.K., Martyanov A.A., Filkova A.A., Panteleev M.A., Sveshnikova A.N.* Development of a simple kinetic mathematical model of aggregation of particles or clustering of receptors // *Life*. — 2020. — Vol. 10, No. 6. — P. 97.
- Gutierrez N.G., Mukherjee D., Bark D. Jr.* Decoding thrombosis through code: a review of computational models // *Journal of Thrombosis and Haemostasis*. — 2023. — DOI: 10.1016/j.jtha.2023.08.021
- Kaiser R., Escaig R., Nicolai L.* Hemostasis without clot formation — how platelets guard the vasculature in inflammation, infection, and malignancy // *Blood*. — 2023. — Vol. 142, No. 17. — P. 1413–1425. — DOI: 10.1182/blood.2023020535

- Kamocka M. M., Mu J., Liu X., Chen N., Zollman A., Sturonas-Brown B. Rosen E. D. et al.* Two-photon intravital imaging of thrombus development // *Journal of biomedical optics*. — 2010. — Vol. 15, No. 1. — P. 016020.
- Kaneva V. N., Dunster J. L., Volpert V., Ataullahanov F., Panteleev M. A., Nechipurenko D. Yu.* Modeling thrombus shell: linking adhesion receptor properties and macroscopic dynamics // *Biophysical journal*. — 2021. — Vol. 120, No. 2. — P. 334–351.
- Kovalenko T. A., Giraud M. N., Eckly A., Ribba A. S., Proamer F., Fraboulet S. Sadoul K. et al.* Asymmetrical forces dictate the distribution and morphology of platelets in blood clots // *Cells*. — 2021. — Vol. 10, No. 3. — P. 584.
- LaCroix D.* A reduced equation mathematical model for blood coagulation and fibrinolysis in quiescent plasma // *The International Journal of Structural Changes in Solids*. — 2012. — Vol. 4. — P. 23–35.
- Lahr M. M., van der Zee D. J., Luijckx G. J., Vroomen P. C., Buskens E.* A simulation-based approach for improving utilization of thrombolysis in acute brain infarction // *Medical care*. — 2013. — Vol. 51, No. 12. — P. 1101–1105.
- LeCover R., Orfeo T., Brummel-Ziedins K., Bravo M., Pusateri A., Varner J.* Kinetic modeling of coagulation and fibrinolysis // *IFAC-PapersOnLine*. — 2019. — Vol. 52, No. 26. — P. 94–100.
- Lehmann M., Schoeman R. M., Krohl P. J., Wallbank A. M., Samaniuk J. R., Jandrot-Perrus M., Neeves K. B.* Platelets drive thrombus propagation in a hematocrit and glycoprotein VI-dependent manner in an in vitro venous thrombosis model // *Arteriosclerosis, thrombosis, and vascular biology*. — 2018. — Vol. 38, No. 5. — P. 1052–1062.
- Levine S. N.* Enzyme amplifier kinetics // *Science*. — 1966. — Vol. 152, No. 3722. — P. 651–653.
- Liniger W., Rueggsegger P.* Fibrinolysis: mathematical and experimental studies // *Thrombosis and Haemostasis*. — 1967. — Vol. 17, No. 03/04. — P. 412–417.
- Lobanov A. I., Starozhilova T. K.* The effect of convective flows on blood coagulation processes // *Pathophysiology of haemostasis and thrombosis*. — 2006. — Vol. 34, No. 2–3. — P. 121–134.
- Mangin P. H., Gardiner E. E., Nesbitt W. S., Kerrigan S. W., Korin N., Lam W. A., Panteleev M. A.* In vitro flow based systems to study platelet function and thrombus formation: recommendations for standardization: communication from the SSC on Biorheology of the ISTH // *Journal of Thrombosis and Haemostasis*. — 2020. — Vol. 18, No. 3. — P. 748–752.
- Marar T. T., Matzko C. N., Wu J., Esmon C. T., Sinno T., Brass L. F., Tomaiuolo M. et al.* Thrombin spatial distribution determines protein C activation during hemostasis and thrombosis // *Blood, The Journal of the American Society of Hematology*. — 2022. — Vol. 139, No. 12. — P. 1892–1902.
- Martyanov A. A., Balabin F. A., Dunster J. L., Panteleev M. A., Gibbins J. M., Sveshnikova A. N.* Control of platelet CLEC-2-mediated activation by receptor clustering and tyrosine kinase signaling // *Biophysical journal*. — 2020a. — Vol. 118, No. 11. — P. 2641–2655.
- Martyanov A. A., Morozova D. S., Sorokina M. A., Filkova A. A., Fedorova D. V., Uzueva S. S., Sveshnikova A. N. et al.* Heterogeneity of integrin $\alpha\text{IIb}\beta 3$ function in pediatric immune thrombocytopenia revealed by continuous flow cytometry analysis // *International Journal of Molecular Sciences*. — 2020b. — Vol. 21, No. 9. — P. 3035.
- Masalceva A. A., Kaneva V. N., Panteleev M. A., Ataullakhanov F., Volpert V., Afanasyev I., Nechipurenko D. Yu.* Analysis of microvascular thrombus mechanobiology with a novel particle-based model // *Journal of Biomechanics*. — 2022. — Vol. 130. — P. 110801.
- Mitrophanov A. Y., Szlam F., Sniecinski R. M., Levy J. H., Reifman J.* Controlled multifactorial coagulopathy: effects of dilution, hypothermia, and acidosis on thrombin generation in vitro // *Anesthesia & Analgesia*. — 2020. — Vol. 130, No. 4. — P. 1063–1076.
- Moiseyev G., Givli S., Bar-Yoseph P. Z.* Fibrin polymerization in blood coagulation — A statistical model // *Journal of biomechanics*. — 2013. — Vol. 46, No. 1. — P. 26–30.

- Mountrakis L., Lorenz E., Hoekstra A. G.* Where do the platelets go? A simulation study of fully resolved blood flow through aneurysmal vessels // *Interface Focus*. — 2013. — Vol. 3, No. 2. — P. 20120089.
- Nechipurenko D. Yu., Receveur N., Yakimenko A. O., Shepelyuk T. O., Yakusheva A. A., Kerimov R. R., Pantelev M. A. et al.* Clot contraction drives the translocation of procoagulant platelets to thrombus surface // *Arteriosclerosis, thrombosis, and vascular biology*. — 2019. — Vol. 39, No. 1. — P. 37–47.
- Nechipurenko D. Yu., Shibeko A. M., Sveshnikova A. N., Pantelev M. A.* In silico hemostasis modeling and prediction // *Hämostaseologie*. — 2020. — Vol. 40, No. 04. — P. 524–535.
- Nelson A. C., Kelley M. A., Haynes L. M., Leiderman K.* Mathematical models of fibrin polymerization: past, present, and future // *Current Opinion in Biomedical Engineering*. — 2021. — Vol. 20. — P. 100350.
- Obydeny S. I., Sveshnikova A. N., Ataullakhanov F. I., Pantelev M. A.* Dynamics of calcium spiking, mitochondrial collapse and phosphatidylserine exposure in platelet subpopulations during activation // *Journal of Thrombosis and Haemostasis*. — 2016. — Vol. 14, No. 9. — P. 1867–1881.
- Pancaldi F., Kim O. V., Weisel J. W., Alber M., Xu Z.* Computational biomechanical modeling of fibrin networks and platelet-fiber network interactions // *Current opinion in biomedical engineering*. — 2022. — Vol. 22. — P. 100369.
- Pantelev M. A., Ananyeva N. M., Ataullakhanov F. I., Saenko E. L.* Mathematical models of blood coagulation and platelet adhesion: clinical applications // *Current pharmaceutical design*. — 2007. — Vol. 13, No. 14. — P. 1457–1467.
- Pantelev M. A., Ananyeva N. M., Greco N. J., Ataullakhanov F. I., Saenko E. L.* Two subpopulations of thrombin-activated platelets differ in their binding of the components of the intrinsic factor X-activating complex // *Journal of Thrombosis and Haemostasis*. — 2005. — Vol. 3, No. 11. — P. 2545–2553.
- Pantelev M. A., Andreeva A. A., Lobanov A. I.* Differential drug target selection in blood coagulation: What can we get from computational systems biology models? // *Current Pharmaceutical Design*. — 2020. — Vol. 26, No. 18. — P. 2109–2115.
- Pantelev M. A., Balandina A. N., Lipets E. N., Ovanesov M. V., Ataullakhanov F. I.* Task-oriented modular decomposition of biological networks: trigger mechanism in blood coagulation // *Biophysical journal*. — 2010. — Vol. 98, No. 9. — P. 1751–1761.
- Pantelev M. A., Dashkevich N. M., Ataullakhanov F. I.* Hemostasis and thrombosis beyond biochemistry: roles of geometry, flow and diffusion // *Thrombosis Research*. — 2015. — Vol. 136, No. 4. — P. 699–711.
- Pantelev M. A., Korin N., Reesink K. D., Bark D. L., Cosemans J. M., Gardiner E. E., Mangin P. H.* Wall shear rates in human and mouse arteries: Standardization of hemodynamics for in vitro blood flow assays: Communication from the ISTH SSC subcommittee on biorheology // *Journal of Thrombosis and Haemostasis*. — 2021. — Vol. 19, No. 2. — P. 588–595.
- Pantelev M. A., Ovanesov M. V., Kireev D. A., Shibeko A. M., Sinauridze E. I., Ananyeva N. M., Ataullakhanov F. I. et al.* Spatial propagation and localization of blood coagulation are regulated by intrinsic and protein C pathways, respectively // *Biophysical journal*. — 2006. — Vol. 90, No. 5. — P. 1489–1500.
- Parunov L. A., Fadeeva O. A., Balandina A. N., Soshitova N. P., Kopylov K. G., Kumskova M. A., Pantelev M. A. et al.* Improvement of spatial fibrin formation by the anti-TFPI aptamer BAX499: changing clot size by targeting extrinsic pathway initiation // *Journal of Thrombosis and Haemostasis*. — 2011. — Vol. 9, No. 9. — P. 1825–1834.
- Petkantchin R., Rousseau A., Eker O., Zouaoui Boudjeltia K., Raynaud F., Chopard B.* A simplified mesoscale 3D model for characterizing fibrinolysis under flow conditions // *Scientific reports*. — 2023. — Vol. 13, No. 1. — P. 13681.

- Piebalgs A., Gu B., Roi D., Lobotesis K., Thom S., Xu X. Y.* Computational simulations of thrombolytic therapy in acute ischaemic stroke // *Scientific reports*. — 2018. — Vol. 8, No. 1. — P. 15810.
- Podoplelova N. A., Nechipurenko D. Yu., Ignatova A. A., Sveshnikova A. N., Pantelev M. A.* Procoagulant platelets: mechanisms of generation and action // *Hämostaseologie*. — 2021. — Vol. 41, No. 02. — P. 146–153.
- Podoplelova N. A., Sveshnikova A. N., Kotova Y. N., Eckly A., Receveur N., Nechipurenko D. Yu., Pantelev M. A. et al.* Coagulation factors bound to procoagulant platelets concentrate in cap structures to promote clotting // *Blood, The Journal of the American Society of Hematology*. — 2016a. — Vol. 128, No. 13. — P. 1745–1755.
- Podoplelova N. A., Sveshnikova A. N., Kurasawa J. H., Sarafanov A. G., Chambost H., Vasil'ev S. A., Pantelev M. et al.* Hysteresis-like binding of coagulation factors X/Xa to procoagulant activated platelets and phospholipids results from multistep association and membrane-dependent multimerization // *Biochimica et Biophysica Acta (BBA) – Biomembranes*. — 2016b. — Vol. 1858, No. 6. — P. 1216–1227.
- Qureshi A., Darwish O., Dillon-Murphy D., Chubb H., Williams S., Nechipurenko D., De Vecchi A.* Modelling left atrial flow and blood coagulation for risk of thrombus formation in atrial fibrillation // *2020 Computing in Cardiology*. — IEEE, 2020. — P. 1–4.
- Qureshi A., Lip G. Y., Nordsletten D. A., Williams S. E., Aslanidi O., De Vecchi A.* Imaging and biophysical modelling of thrombogenic mechanisms in atrial fibrillation and stroke // *Frontiers in Cardiovascular Medicine*. — 2023. — Vol. 9. — P. 1074562.
- Ratto N., Tokarev A., Chelle P., Tardy-Poncet B., Volpert V.* Clustering of thrombin generation test data using a reduced mathematical model of blood coagulation // *Acta Biotheoretica*. — 2020. — Vol. 68. — P. 21–43.
- Receveur N., Nechipurenko D., Knapp Y., Yakusheva A., Maurer E., Denis C. V., Mangin P. H. et al.* Shear rate gradients promote a bi-phasic thrombus formation on weak adhesive proteins, such as fibrinogen in a von Willebrand factor-dependent manner // *Haematologica*. — 2020. — Vol. 105, No. 10. — P. 2471.
- Shakhidzhanov S. S., Shaturny V. I., Pantelev M. A., Sveshnikova A. N.* Modulation and pre-amplification of PAR1 signaling by ADP acting via the P2Y12 receptor during platelet subpopulation formation // *Biochimica et Biophysica Acta (BBA) – General Subjects*. — 2015. — Vol. 1850, No. 12. — P. 2518–2529.
- Shankar K. N., Zhang Y., Sinno T., Diamond S. L.* A three-dimensional multiscale model for the prediction of thrombus growth under flow with single-platelet resolution // *PLoS computational biology*. — 2022. — Vol. 18, No. 1. — P. e1009850.
- Shepelyuk T. O., Pantelev M. A., Sveshnikova A. N.* Computational modeling of quiescent platelet energy metabolism in the context of whole-body glucose turnover // *Mathematical Modelling of Natural Phenomena*. — 2016. — Vol. 11, No. 6.
- Shibeko A. M., Chopard B., Hoekstra A. G., Pantelev M. A.* Redistribution of TPA fluxes in the presence of PAI-1 regulates spatial thrombolysis // *Biophysical journal*. — 2020. — Vol. 119, No. 3. — P. 638–651.
- Shibeko A. M., Lobanova E. S., Pantelev M. A., Ataullakhanov F. I.* Blood flow controls coagulation onset via the positive feedback of factor VII activation by factor Xa // *BMC systems biology*. — 2010. — Vol. 4, No. 1. — P. 1–12.
- Shibeko A. M., Pantelev M. A.* Untangling the complexity of blood coagulation network: use of computational modelling in pharmacology and diagnostics // *Briefings in Bioinformatics*. — 2016. — Vol. 17, No. 3. — P. 429–439.
- Staessens S., Denorme F., Francois O., Desender L., Dewaele T., Vanacker P., De Meyer S. F. et al.* Structural analysis of ischemic stroke thrombi: histological indications for therapy resistance // *Haematologica*. — 2020. — Vol. 105, No. 2. — P. 498.

- Staessens S., François O., Desender L., Vanacker P., Dewaele T., Sciot R., De Meyer S. F. et al.* Detailed histological analysis of a thrombectomy-resistant ischemic stroke thrombus: a case report // *Thrombosis Journal*. — 2021. — Vol. 19. — P. 1–7.
- Stalker T. J., Traxler E. A., Wu J., Wannemacher K. M., Cermignano S. L., Voronov R., Brass L. F. et al.* Hierarchical organization in the hemostatic response and its relationship to the platelet-signaling network // *Blood, The Journal of the American Society of Hematology*. — 2013. — Vol. 121, No. 10. — P. 1875–1885.
- Susree M., Panteleev M. A., Anand M.* Coated platelets introduce significant delay in onset of peak thrombin production: Theoretical predictions // *Journal of theoretical biology*. — 2018. — Vol. 453. — P. 108–116.
- Sveshnikova A. N., Ataullakhanov F. I., Panteleev M. A.* Compartmentalized calcium signaling triggers subpopulation formation upon platelet activation through PAR1 // *Molecular BioSystems*. — 2015. — Vol. 11, No. 4. — P. 1052–1060.
- Sveshnikova A. N., Balatskiy A. V., Demianova A. S., Shepelyuk T. O., Shakhidzhanov S. S., Balatskaya M. N., Panteleev M. A. et al.* Systems biology insights into the meaning of the platelet's dual-receptor thrombin signaling // *Journal of Thrombosis and Haemostasis*. — 2016. — Vol. 14, No. 10. — P. 2045–2057.
- Tomaiuolo M., Stalker T. J., Welsh J. D., Diamond S. L., Sinno T., Brass L. F.* A systems approach to hemostasis: 2. Computational analysis of molecular transport in the thrombus microenvironment // *Blood, The Journal of the American Society of Hematology*. — 2014. — Vol. 124, No. 11. — P. 1816–1823.
- Topalov N. N., Yakimenko A. O., Canault M., Artemenko E. O., Zakharova N. V., Abaeva A. A., Panteleev M. A. et al.* Two types of procoagulant platelets are formed upon physiological activation and are controlled by integrin $\alpha\text{IIb}\beta 3$ // *Arteriosclerosis, thrombosis, and vascular biology*. — 2012. — Vol. 32, No. 10. — P. 2475–2483.
- Tosenberger A., Ataullakhanov F., Bessonov N., Panteleev M., Tokarev A., Volpert V.* Modelling of platelet–fibrin clot formation in flow with a DPD–PDE method // *Journal of mathematical biology*. — 2016. — Vol. 72. — P. 649–681.
- Tosenberger A., Ataullakhanov F., Bessonov N., Panteleev M., Tokarev A., Volpert V.* Modelling of thrombus growth in flow with a DPD–PDE method // *Journal of theoretical biology*. — 2013. — Vol. 337. — P. 30–41.
- Trifanov P. V., Kaneva V. N., Strijhak S. V., Panteleev M. A., Ataullakhanov F. I., Dunster J., Nechipurenko D. Yu. et al.* Developing quasi-steady model for studying hemostatic response using supercomputer technologies // *Supercomputing Frontiers and Innovations*. — 2018. — Vol. 5, No. 4. — P. 67–72.
- Weisel J. W., Nagaswami C.* Computer modeling of fibrin polymerization kinetics correlated with electron microscope and turbidity observations: clot structure and assembly are kinetically controlled // *Biophysical journal*. — 1992. — Vol. 63, No. 1. — P. 111–128.
- Welsh J. D., Poventud-Fuentes I., Sampietro S., Diamond S. L., Stalker T. J., Brass L. F.* Hierarchical organization of the hemostatic response to penetrating injuries in the mouse macrovasculature // *Journal of Thrombosis and Haemostasis*. — 2017. — Vol. 15, No. 3. — P. 526–537.
- Xu Z., Christley S., Lioi J., Kim O., Harvey C., Sun W., Alber M. et al.* Multiscale model of fibrin accumulation on the blood clot surface and platelet dynamics // *Methods in cell biology*. — Academic Press, 2012. — Vol. 110. — P. 367–388.
- Yakusheva A. A., Butov K. R., Bykov G. A., Závodszy G., Eckly A., Ataullakhanov F. I., Mangin P. H. et al.* Traumatic vessel injuries initiating hemostasis generate high shear conditions // *Blood Advances*. — 2022. — Vol. 6, No. 16. — P. 4834–4846.

- Yesudasan S., Wang X., Averett R.D.* Coarse-grained molecular dynamics simulations of fibrin polymerization: effects of thrombin concentration on fibrin clot structure // *Journal of molecular modeling*. — 2018a. — Vol. 24. — P. 1–14.
- Yesudasan S., Wang X., Averett R.D.* Fibrin polymerization simulation using a reactive dissipative particle dynamics method // *Biomechanics and modeling in mechanobiology*. — 2018b. — Vol. 17. — P. 1389–1403.
- Zhalyalov A.S., Panteleev M.A., Gracheva M.A., Ataulakhanov F.I., Shibeko A.M.* Co-ordinated spatial propagation of blood plasma clotting and fibrinolytic fronts // *PLoS One*. — 2017. — Vol. 12, No. 7. — P. e0180668.
- Zhang Z., Zhu J., Wu M., Neidlin M., Wu W.T., Wu P.* Computational modeling of hemodynamics and risk of thrombosis in the left atrial appendage using patient-specific blood viscosity and boundary conditions at the mitral valve // *Biomechanics and Modeling in Mechanobiology*. — 2023. — Vol. 22, No. 4. — P. 1447–1457.

УДК: 577.355+581.132+51-76

Анализ скорости электронного транспорта через фотосинтетический цитохромный b_6f -комплекс

С. С. Хрущев^а, П. В. Фурсова, Т. Ю. Плюсина, Г. Ю. Ризниченко,
А. Б. Рубин

Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова
Россия, 119992, г. Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 12

E-mail: ^а styx@biophys.msu.ru

Получено 03.06.2024, после доработки — 04.08.2024.

Принято к публикации 12.08.2024.

Рассматривается основанный на методах линейной алгебры подход к анализу скорости электронного транспорта через цитохромный b_6f -комплекс. В предложенном подходе зависимость квазистационарного потока электронов через комплекс от степени восстановленности пулов мобильных переносчиков электрона выступает в качестве функции отклика, характеризующей этот процесс. Разработано программное обеспечение на языке программирования Python, позволяющее построить основное кинетическое уравнение для комплекса по схеме элементарных реакций и вычислить квазистационарные скорости электронного транспорта через комплекс и динамику их изменения в ходе переходного процесса. Вычисления проводятся в многопоточном режиме, что позволяет эффективно использовать ресурсы современных вычислительных систем и за сравнительно небольшое время получать данные о функционировании комплекса в широком диапазоне параметров. Предложенный подход может быть легко адаптирован для анализа электронного транспорта в других компонентах фотосинтетической и дыхательной электрон-транспортной цепи, а также других процессов в сложных мультиферментных комплексах, содержащих несколько реакционных центров. Для параметризации модели цитохромного b_6f -комплекса использованы данные криоэлектронной микроскопии и окислительно-восстановительного титрования. Получены зависимости квазистационарной скорости восстановления пластоцианина и окисления пластохинона от степени восстановленности пулов мобильных переносчиков электрона и проанализирована динамика изменения скорости в ответ на изменение редокс-состояния пула пластохинонов. Результаты моделирования находятся в хорошем согласовании с имеющимися экспериментальными данными.

Ключевые слова: фотосинтез, электронный транспорт, основное кинетическое уравнение, функция отклика, цитохромный комплекс

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда, грант № 22-11-00009.

© 2024 Сергей Сергеевич Хрущев, Полина Викторовна Фурсова, Татьяна Юрьевна Плюсина, Галина Юрьевна Ризниченко, Андрей Борисович Рубин

Статья доступна по лицензии Creative Commons Attribution-NoDerivs 3.0 Unported License.
Чтобы получить текст лицензии, посетите веб-сайт <http://creativecommons.org/licenses/by-nd/3.0/>
или отправьте письмо в Creative Commons, PO Box 1866, Mountain View, CA 94042, USA.

UDC: 577.355+581.132+51-76

Analysis of the rate of electron transport through photosynthetic cytochrome b_6f complex

S. S. Khrushev^a, P. V. Fursova, T. Yu. Plusnina, G. Yu. Riznichenko,
A. B. Rubin

Lomonosov Moscow State University,
1/12 Leninskie Gory, Moscow, 119992, Russia

E-mail: ^a styx@biophys.msu.ru

Received 03.06.2024, after completion — 04.08.2024.

Accepted for publication 12.08.2024.

We consider an approach based on linear algebra methods to analyze the rate of electron transport through the cytochrome b_6f complex. In the proposed approach, the dependence of the quasi-stationary electron flux through the complex on the degree of reduction of pools of mobile electron carriers is considered a response function characterizing this process. We have developed software in the Python programming language that allows us to construct the master equation for the complex according to the scheme of elementary reactions and calculate quasi-stationary electron transport rates through the complex and the dynamics of their changes during the transition process. The calculations are performed in multithreaded mode, which makes it possible to efficiently use the resources of modern computing systems and to obtain data on the functioning of the complex in a wide range of parameters in a relatively short time. The proposed approach can be easily adapted for the analysis of electron transport in other components of the photosynthetic and respiratory electron-transport chain, as well as other processes in multienzyme complexes containing several reaction centers. Cryo-electron microscopy and redox titration data were used to parameterize the model of cytochrome b_6f complex. We obtained dependences of the quasi-stationary rate of plastocyanin reduction and plastoquinone oxidation on the degree of reduction of pools of mobile electron carriers and analyzed the dynamics of rate changes in response to changes in the redox state of the plastoquinone pool. The modeling results are in good agreement with the available experimental data.

Keywords: photosynthesis, electron transport, master equation, response function, cytochrome complex

Citation: *Computer Research and Modeling*, 2024, vol. 16, no. 4, pp. 997–1022 (Russian).

The work was supported by Russian Science Foundation, grant No. 22-11-00009.

Введение

Фотосинтез является ключевым процессом, обеспечивающим существование жизни на Земле. В ходе фотосинтеза за счет энергии квантов света, поглощаемых молекулами хлорофилла, происходит окисление воды с образованием кислорода и синтез органических веществ (в первую очередь сахаров) из неорганических (углекислого газа и воды). У высших растений и зеленых водорослей фотосинтез происходит в специализированных компартментах клетки — хлоропластах, имеющих достаточно сложную структуру (см. рис. 1), и включает в себя множество элементарных процессов (реакций). В этом множестве принято выделять так называемые первичные процессы фотосинтеза (световые реакции), происходящие в тилакоидной мембране при поглощении квантов света. За счет энергии кванта света в реакционных центрах фотосистем 1 и 2 (ФС1 и ФС2) происходит разделение зарядов, приводящее к появлению крайне реакционноспособных анион- и катион-радикалов. Благодаря цепи окислительно-восстановительных реакций происходит накопление промежуточных соединений, в первую очередь восстановленной формы никотинамиддинуклеотидфосфата (НАДФН) и аденозинтрифосфата (АТФ), которые в дальнейшем служат источником энергии для большинства биохимических процессов, в первую очередь используются в биохимических процессах синтеза сахаров (пентозофосфатный цикл Кальвина – Бенсона – Бассема и цикл Хэтча – Слэка) и других органических соединений (аминокислот, липидов и др.).

Хотя квантовый выход первичных процессов разделения зарядов в реакционных центрах ФС1 и ФС2 близок к 100 %, общая энергетическая эффективность фотосинтеза невысока: у большинства культурных растений только 1–2 % поглощенной солнечной энергии трансформируется в биомассу [Blankenship et al., 2011]. Действие неблагоприятных факторов среды приводит к еще большему снижению эффективности фотосинтеза, что приводит к снижению биомассы и, следовательно, урожайности культур. В связи с этим чрезвычайно актуальной задачей является разработка методов, позволяющих оперативно обнаруживать снижение эффективности фотосинтеза и выявлять причины этого снижения. К настоящему времени разработаны высокоточные биофизические методы, позволяющие по данным неинвазивных оптических измерений оценить активность ФС1 и ФС2 [Kalaji et al., 2014; Kalaji et al., 2016; Klughammer, Schreiber, 1994; Klughammer, Schreiber, 2008a; Klughammer, Schreiber, 2008b]. Создание математических моделей фотосинтетических процессов и их идентификация по экспериментальным данным позволяют получить комплексное понимание того, как факторы внешней среды влияют на эффективность фотосинтеза. Для описания первичных процессов фотосинтеза обычно используются динамические модели в виде системы обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) с использованием формализма химической кинетики (закона действующих масс) [Ризниченко и др., 2022]. Детальное рассмотрение всех процессов, происходящих в фотосинтетической электрон-транспортной цепи (ЭТЦ), требует создания подробных моделей, число дифференциальных уравнений для отдельных состояний компонентов в которых составляет от десятков тысяч до миллионов. Анализ поведения моделей большой размерности представляет собой непростую задачу, для решения которой пока нет общепринятых методов. В данной работе мы рассмотрим несколько подходов к анализу таких систем и созданию на их основе упрощенных моделей с меньшей размерностью.

Анализ электронного потока в фотосинтетической ЭТЦ

Электронный поток в фотосинтетической ЭТЦ определяется несколькими факторами: интенсивностью поглощаемого фотосистемами света, активностью биохимических процессов и собственно пропускной способностью ЭТЦ. В природных условиях характерное время изменения интенсивности света больше по сравнению с характерными временами регуляторных процессов в фотосинтетическом аппарате (ФСА), поэтому наибольший интерес представляет

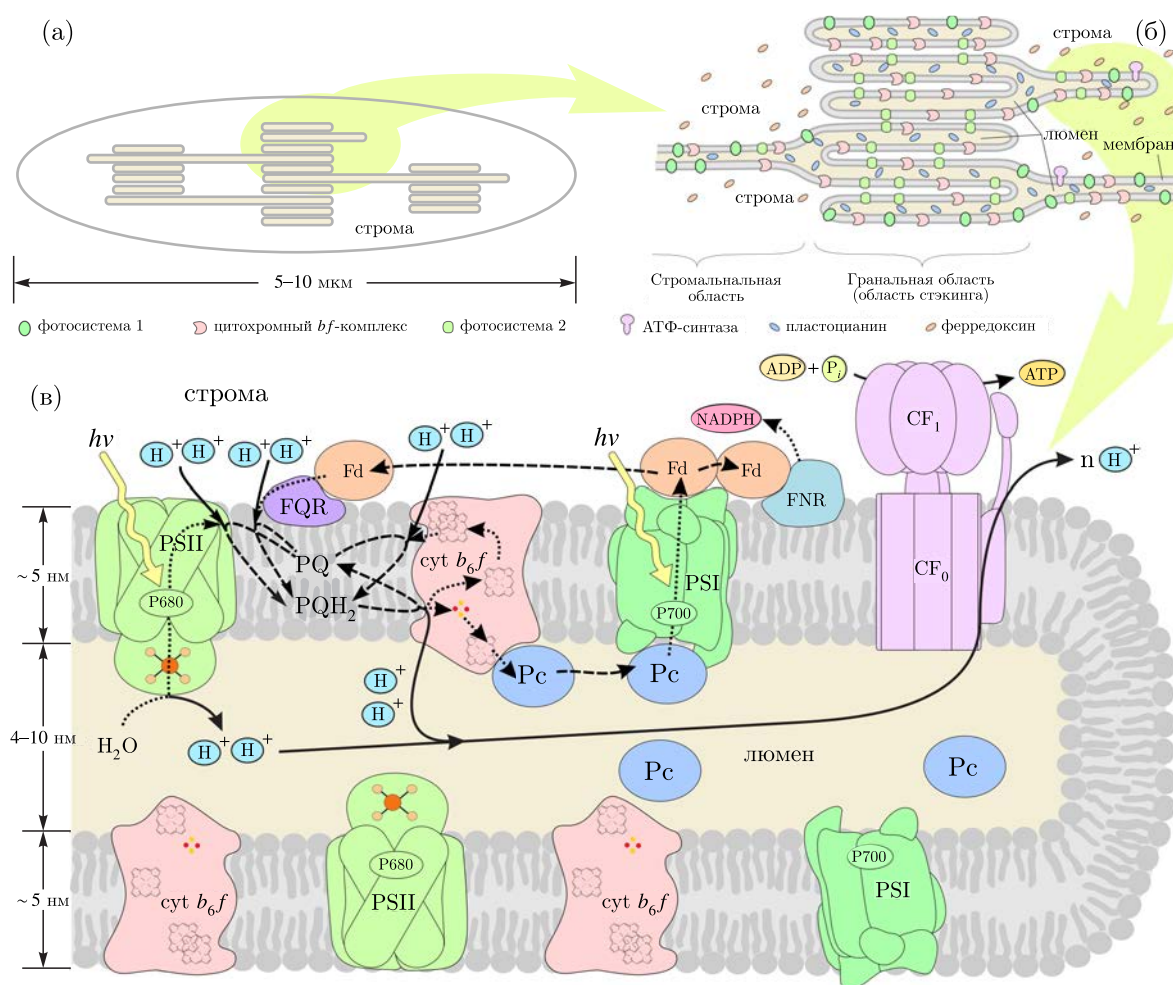


Рис. 1. Организация фотосинтетического аппарата у высших растений и зеленых водорослей: а) схематическое изображение хлоропласта; б) схематическое изображение грани тилакоидов (показано неравномерное распределение трансмембранных мультиферментных комплексов в тилакоидной мембране); в) схема фотосинтетического электронного транспорта. В мембраны встроены мультиферментные комплексы: PSI — фотосистема 1, PSII — фотосистема 2, cyt b_6f — цитохромный b_6f -комплекс, CF₀/CF₁ — АТФ-синтаза. Вблизи наружной поверхности мембраны располагаются FNR — ферредоксин:НАДФ-редуктаза и гипотетический фермент FQR — ферредоксин:пластохинон-редуктаза. Перенос электронов между фотосистемой 2 и цитохромным b_6f -комплексом обеспечивается подвижным переносчиком пластохиноном (PQ/PQH₂), диффундирующим в липидном слое мембраны. В люминальном пространстве диффундирует подвижный переносчик электронов — белок пластоцианин (Pc); в строме — белок ферредоксин (Fd). Перенос электронов между редокс-центрами показан точечными стрелками, транспорт электронов за счет диффузии подвижных переносчиков — штриховыми, транспорт протонов — сплошными

величина стационарного потока электронов. В то же время большинство экспериментальных протоколов для оценки параметров ФСА основаны на регистрации динамики ответа ФСА на быстрое изменение внешних (обычно световых) условий. Таким образом, нам необходимы такие модели функционирования ФСА, идентификация параметров которых проводится по динамическим данным, а в качестве предсказания модели выступает зависимость стационарного потока электронов от внешних условий.

Фотосинтетическая ЭТЦ включает примерно два десятка редокс-кофакторов, большая часть которых сгруппирована в крупные трансмембранные белковые комплексы — ФС1, ФС2

и цитохромный $b_6 f$ -комплекс, которые взаимодействуют между собой с участием мобильных переносчиков электрона — пластохинона, пластоцианина и ферредоксина. Описание такой системы с использованием формализма химической кинетики предполагает, что для белковых комплексов, содержащих несколько редокс-центров, каждая комбинация их состояний должна рассматриваться как отдельный реагент. Происходящие в комплексе реакции можно представить в виде ориентированного графа, вершины которого соответствуют различным состояниям комплекса (то есть комбинациям состояний входящих в его состав активных центров), а ребра — реакциям перехода между этими состояниями. В большинстве случаев из вершины выходит несколько ребер, каждое из которых соответствует изменению состояния одного из активных центров комплекса. В общем случае граф состояний комплекса не является связным, то есть для какой-то пары состояний может отсутствовать последовательность реакций, приводящая к переходу из одного состояния в другое. Такое отсутствие связности может выражаться как в появлении изолированных вершин, то есть состояний, не участвующих ни в одной из химических реакций, так и в разбиении графа на несколько больших связных подграфов. Связность графа состояний может изменяться в зависимости от наличия или отсутствия в среде мобильных переносчиков электрона: добавление переносчика делает возможными те реакции, которые не происходят при его отсутствии.

Основное кинетическое уравнение для комплекса

На основе графа состояний комплекса можно записать систему обыкновенных дифференциальных уравнений для концентраций комплексов в каждом из состояний, а также окисленных и восстановленных форм мобильных переносчиков электрона. В том случае, когда нас интересуют особенности функционирования одного типа комплексов отдельно от других компонентов ЭТЦ, удобно перейти к формализму основного кинетического уравнения (master equation), в котором переменными являются не концентрации состояний, а вероятности нахождения комплекса в каждом из состояний. В каждый момент времени система может быть описана вектором вероятностей $\mathbf{p}$, составленным из значений вероятности нахождения комплекса в каждом из возможных состояний. Сумма всех вероятностей (компонент вектора $\mathbf{p}$) равна 1:

$$\sum_i p_i = 1, \quad (1)$$

значения компонент лежат в диапазоне $0 \leq p_i \leq 1$.

В случае несвязного графа для каждой компоненты связности сумма вероятностей нахождения комплекса в каждом из состояний, входящих в компоненту, не будет изменяться во времени и будет равна суммарной вероятности для этих состояний в начальном состоянии комплекса.

Основное кинетическое уравнение для вероятности нахождения комплекса в каждом из состояний линейно относительно $\mathbf{p}$:

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{p}, \quad (2)$$

где $\mathbf{A}$ — матрица, характеризующая скорости перехода между состояниями.

Рассмотрим элементы матрицы $a_{i,j}$, где i соответствует номеру строки, а j — номеру столбца. Недиagonальные элементы матрицы $\mathbf{A}$ определяют скорость увеличения вероятности нахождения комплекса в i -м состоянии в зависимости от вероятности его нахождения в j -м состоянии за счет соответствующей элементарной реакции. Элемент $a_{i,j}$ равен нулю, если элементарная реакция, приводящая к трансформации j -го состояния комплекса в i -е, отсутствует. Если такая элементарная реакция существует и происходит без взаимодействия с другими реагентами (например, мобильными переносчиками электрона), элемент $a_{i,j}$ равен значению константы скорости этой реакции. Для элементарных реакций, в которых происходит взаимодействие комплекса

с другими реагентами, элемент $a_{i,j}$ равен произведению константы скорости реакции и концентрации соответствующего реагента. Таким образом, недиагональные элементы матрицы **A** всегда неотрицательны.

Диагональные элементы $a_{i,i}$ характеризуют уменьшение вероятности нахождения комплекса в i -м состоянии за счет всех возможных элементарных реакций, для которых это состояние является субстратом. Соответственно,

$$a_{i,i} = - \sum_{i, j \neq i} a_{i,j}, \quad (3)$$

то есть диагональные элементы представляют собой взятые с обратным знаком суммы недиагональных элементов каждого столбца матрицы **A**. Соответственно, для каждого столбца

$$\sum_i a_{i,j} = 0. \quad (4)$$

Такое построение матрицы гарантирует, что она является вырожденной и по крайней мере одно из ее собственных значений равно нулю [Keizer, 1972]. Это можно показать исходя из свойств определителя матрицы. При добавлении к любой строке матрицы линейной комбинации других ее строк определитель не изменяется. Соответственно, вследствие (4) в матрице **A** мы можем заменить любую строку строкой, состоящей из нулей. Следовательно, поскольку общий множитель элементов какой-либо строки можно вынести за знак определителя, определитель матрицы **A** равен нулю, а значит, произведение собственных значений этой матрицы также равно нулю, что возможно только в том случае, если по крайней мере одно из собственных значений равно нулю.

В том случае, если граф переходов между состояниями комплекса является сильно связным, то есть для любой пары состояний i и j существует как путь из i в j , так и путь из j в i , нулю равно только одно из собственных значений [Keizer, 1972]; в противном случае нулю будут равны столько собственных значений, на сколько компонент сильной связности разбивается граф переходов между состояниями комплекса. Без потери общности мы можем рассматривать только ситуацию, когда все компоненты связности графа переходов между состояниями являются сильными. Это оправдано тем, что с точки зрения физической химии все реакции обратимы, условно необратимыми считаются реакции, для которых константа равновесия (отношение констант скорости прямой и обратной реакций) очень велика. Перенумеруем состояния так, чтобы сначала шли все состояния из одной компоненты связности, затем второй и т. д. Тогда матрица **A** примет блочно-диагональный вид, и ее определитель будет равен произведению определителей блоков. Каждый блок обладает теми же свойствами, что и матрица для связного графа, а именно вырожденностью и нулевым собственным значением. Таким образом, кратность нулевого собственного значения будет равна количеству компонент сильной связности графа переходов между состояниями. Действительная часть остальных собственных значений отрицательна [Fernengel, Drossel, 2022]. Для простоты в дальнейшем мы рассматриваем граф, состоящий из одной компоненты сильной связности.

Нахождение стационарного состояния комплекса

Поскольку действительная часть всех собственных значений матрицы **A** меньше или равна нулю, при $t \rightarrow +\infty$ система стремится прийти в стационарное состояние $\hat{\mathbf{p}}$. В реальной биологической системе взаимодействие белкового комплекса с мобильными переносчиками электронов приводит к изменению их концентрации в среде и соответствующему изменению элементов матрицы **A**. В том случае, если концентрации мобильных переносчиков значительно превышают концентрацию белковых комплексов, эти изменения концентрации пренебрежимо малы, и на

доступных для наблюдения временах мы можем рассматривать приближение системы к квазистационарному состоянию $\bar{\mathbf{p}}$ при постоянной концентрации мобильных переносчиков электрона. Поскольку матрица $\mathbf{A}$ зависит от параметров элементарных реакций и размеров и степени восстановленности пулов мобильных переносчиков электрона, вектор $\bar{\mathbf{p}}$ также может рассматриваться как функция от этих параметров.

Вектор $\bar{\mathbf{p}}$ пропорционален собственному вектору матрицы $\mathbf{A}$, соответствующему нулевому собственному значению, и, если мы знаем собственные значения и собственные вектора матрицы, может быть найден исходя из того, что сумма его компонент равна единице. Однако с вычислительной точки зрения такой способ нахождения квазистационарного состояния крайне неэффективен. Принимая, что в состоянии равновесия $\frac{d\mathbf{p}}{dt} = \mathbf{0}$, для нахождения квазистационарного состояния $\bar{\mathbf{p}}$ достаточно решить систему линейных алгебраических уравнений

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{p} = \mathbf{0}. \quad (5)$$

Однородная система линейных уравнений всегда имеет тривиальное решение. Поскольку $\det \mathbf{A} = 0$, то система (5) имеет бесконечное множество ненулевых решений. Примем во внимание, что нас интересуют только те решения, которые удовлетворяют условию (1). В том случае, если граф переходов между состояниями комплекса является сильно связным, мы можем заменить уравнение для одного из состояний на закон сохранения. Для определенности сделаем это для последнего уравнения, тогда для комплекса с n состояниями мы получим следующую систему уравнений:

$$\begin{pmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} & \cdots & a_{1,n-1} & a_{1,n} \\ a_{2,1} & a_{2,2} & \cdots & a_{2,n-1} & a_{2,n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ a_{n-1,1} & a_{n-1,2} & \cdots & a_{n-1,n-1} & a_{n-1,n} \\ 1 & 1 & \cdots & 1 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} p_1 \\ p_2 \\ \vdots \\ p_{n-1} \\ p_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (6)$$

Обозначим матрицу $\mathbf{A}$ с последней строкой, замененной на единицы, как $\mathbf{A}_1$, а вектор, состоящий из $n-1$ нулей и последней единицы, — как $\mathbf{b}$, тогда мы можем записать уравнение (6) как

$$\mathbf{A}_1 \cdot \mathbf{p} = \mathbf{b}. \quad (6')$$

В работах [Hill, 1966; Schnakenberg, 1976; Fernengel, Drossel, 2022] даны доказательства единственности решения системы (6'), а также способы построения стационарного состояния и решения основного кинетического уравнения.

Моделирование переходных процессов

Изменение степени восстановленности пулов мобильных переносчиков электрона влечет за собой изменение значений элементов матрицы скоростей переходов между состояниями и приводит к переходному процессу в белковом комплексе. Для его моделирования необходимо найти зависимость вектора вероятностей $\mathbf{p}$ от времени t . Мы рассматриваем ситуацию, когда в нулевой момент времени происходит скачкообразное изменение параметров системы. Будем считать, что в 0-й момент времени система характеризуется матрицей скоростей $\mathbf{A}_0$ и находится в состоянии равновесия $\mathbf{p}_0$. Вектор вероятностей $\mathbf{p}_0$ можно рассчитать как решение уравнения (6') для матрицы $\mathbf{A}_0$. Необходимо найти решение задачи Коши

$$\begin{cases} \frac{d\mathbf{p}}{dt} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{p}, \\ \mathbf{p}(0) = \mathbf{p}_0. \end{cases} \quad (7)$$

Решение этой задачи задается матричной экспоненциальной функцией:

$$\mathbf{p}(t) = \mathbf{p}_0 \cdot e^{\mathbf{A} \cdot t}. \quad (8)$$

Поскольку нас интересуют значения $\mathbf{p}(t)$ для большого числа различных моментов времени t , нам необходим эффективный с вычислительной точки зрения способ нахождения этой функции. Оптимальным представляется поиск фундаментальной системы решений для уравнения (2). Для ее нахождения нужно вычислить для матрицы $\mathbf{A}$ правые собственные вектора $\mathbf{ER}_i$ и собственные значения EV_i . Общее решение основного кинетического уравнения может быть записано в виде

$$\tilde{\mathbf{p}}(t) = \sum_i m_i \cdot e^{EV_i \cdot t} \cdot \mathbf{ER}_i, \quad (9)$$

где m_i — произвольные множители. Чтобы найти частное решение, соответствующее начальному условию $\mathbf{p}_0$, необходимо решить систему линейных алгебраических уравнений

$$\mathbf{ER} \cdot \mathbf{m} = \mathbf{p}_0, \quad (10)$$

где $\mathbf{ER}$ — матрица, составленная из собственных векторов матрицы $\mathbf{A}$, а $\mathbf{m}$ — вектор, составленный из множителей m_i .

Для нахождения собственных векторов и собственных значений матрицы обычно матрицу приводят к форме Хессенберга, после чего используют QR-алгоритм [Anderson et al., 1999]. Чтобы уменьшить связанные с численными методами ошибки, можно воспользоваться априорным знанием о собственных значениях и собственных векторах матрицы $\mathbf{A}$. Поскольку в случае полностью связного графа состояний комплекса матрица $\mathbf{A}$ имеет ровно одно нулевое собственное значение, а соответствующий ему собственный вектор может быть вычислен решением уравнения вида (6'), мы можем таким образом уточнить результаты, полученные с помощью QR-алгоритма. Сумма (9), задающая решение основного кинетического уравнения, при $t \rightarrow +\infty$ стремится к слагаемому, соответствующему нулевому собственному значению. При этом само решение стремится к стационарному (см. предыдущий раздел). Таким образом, множитель m_i , соответствующий найденному из уравнения (6') собственному вектору, равен единице.

Переход от вектора вероятностей к макропараметрам системы

Вектор $\mathbf{p}$ зависит как от значений констант скоростей всех элементарных реакций в комплексе, так и от концентраций внешних реагентов, с которыми взаимодействует комплекс. Таким образом, варьируя эти параметры, мы можем установить, каким образом их изменение сказывается на состоянии комплекса. Однако, ввиду большой размерности вектора вероятностей, представление состояния комплекса в виде такого вектора не позволяет наглядно оценить, в чем заключаются вызванные изменением параметров изменения в состоянии комплекса. Чтобы получить более удобное представление, необходимо на основе детального описания состояния комплекса в виде вектора вероятностей получить его упрощенное описание в виде набора скалярных макропараметров.

Наиболее очевидным из таких макропараметров является доля комплексов, в которых конкретный активный центр находится в определенном состоянии. Для вычисления значения такого макропараметра необходимо просто просуммировать те компоненты вектора $\mathbf{p}$, которые соответствуют нужным состояниям. В векторном виде это может быть записано как скалярное произведение вектора $\mathbf{p}$ и вектора $\mathbf{s}$, компоненты которого равны единице для интересующих нас состояний комплекса и нулю — для всех остальных состояний:

$$x = \mathbf{s} \cdot \mathbf{p}. \quad (11)$$

Схожим образом мы можем определить наблюдающуюся в стационарном состоянии суммарную скорость какой-либо элементарной реакции (например, транспорта электронов) в комплексе как сумму скоростей реакций между всеми возможными состояниями комплекса. Вклад каждого состояния в суммарную скорость положителен, если состояние выступает в качестве субстрата реакции, отрицателен для продукта реакции и равен нулю для состояний, не участвующих в данной реакции. В векторном виде это также может быть записано как скалярное произведение:

$$v = \mathbf{c} \cdot \mathbf{p}, \quad (12)$$

где компоненты вектора $\mathbf{c}$ равны нулю для состояний, не участвующих в реакции, константе скорости прямой реакции — для состояний, являющихся субстратом реакции, и взятой с обратным знаком константе скорости обратной реакции — для состояний, являющихся продуктом реакции. Для реакций второго порядка с участием мобильных переносчиков электронов константы скорости домножаются на концентрацию соответствующего переносчика.

Такой подход к получению скалярных характеристик ансамбля белковых комплексов может быть использован как при описании динамики поведения системы, так и для описания ее квазистационарного состояния. Поскольку значение вектора $\bar{\mathbf{p}}$ зависит от значений констант скоростей элементарных реакций и от концентраций внешних реагентов, значения скалярных величин $\bar{x}$ и $\bar{v}$, вычисленных по уравнениям вида (11) и (12) для квазистационарного состояния, также будут зависеть от этих параметров. В дальнейшем мы будем рассматривать зависимости таким образом определенных величин от степени восстановленности пулов мобильных переносчиков электрона и других внешних условий как функции отклика (response functions) для соответствующих состояний и процессов. Важной функцией отклика, характеризующей трансмембранные электрон-транспортные комплексы, является скорость потока электронов между пулами мобильных переносчиков электрона через эти комплексы. Поскольку перенос электрона между донорной и акцепторной стороной комплекса обычно включает несколько последовательных стадий, выбор вектора коэффициентов $\mathbf{c}$ для расчета квазистационарного потока $\bar{v}$ является неоднозначным: для определения функции отклика может быть использована любая из последовательных стадий электронного транспорта, поскольку в этих условиях скорости последовательных стадий одинаковы. В то же время динамика изменения величины v для этих последовательных стадий в ходе переходного процесса может существенно различаться.

Структура и особенности функционирования цитохромного b_6f -комплекса

Рассмотрим предложенный подход на примере функций отклика для одного из компонентов фотосинтетической ЭТЦ — цитохромного b_6f -комплекса. Цитохромный b_6f -комплекс выступает в качестве центрального хаба, через который проходит как линейный поток электронов от ФС2 к ФС1, так и циклический поток электронов вокруг ФС1. b_6f -комплексы достаточно равномерно распределены по всей тилакоидной мембране и имеют практически одинаковую поверхностную плотность как в гранальных участках, где преобладает ФС2, так и в стромальных участках, где преобладает ФС1 и АТФаза [Albertson, 2001; Kirchhoff et al., 2007; Johnson et al., 2014]. Окисление пластохинона цитохромным b_6f -комплексом сопряжено с переносом протонов из стромы в люмен и формированием трансмембранного градиента pH, необходимого для синтеза АТФ. Кроме участия в электронном и протонном транспорте, предполагается, что цитохромный b_6f -комплекс выполняет и регуляторную функцию, участвуя в активации Stt7-киназы (у микроводорослей) и STN7-киназы (у высших растений) при увеличении степени восстановленности пула пластохинонов. Эта активация приводит к фосфорилированию белков светособирающего комплекса LHC2 и их переходу от ФС2 к ФС1 (state transition), что приводит к уменьше-

нию линейного потока электронов по сравнению с циклическим [Shapiguzov et al., 2016; Finazzi, Minagawa, Johnson, 2016; Singh et al., 2016].

До 2003 года предполагалось, что механизм функционирования этого комплекса в целом аналогичен механизму, подробно изученному для митохондриального комплекса bc_1 (ко-энзим Q – цитохром с редуктаза), и представляет собой вариацию предложенного Митчеллом Q-цикла. Однако Д. Штрёбелем с соавторами [Stroebel et al., 2003] было установлено, что в сайте, гомологичном Q_n -сайту комплекса bc_1 , в цитохромном b_6f -комплексе расположен еще один гем с-типа c_n . В 2022 году [Szwalec et al., 2022] было установлено, что соотношение окислительно-восстановительных потенциалов гемов типа b в комплексах bc_1 и b_6f различается: в комплексе bc_1 потенциал гема, расположенного вблизи Q_p -сайта, ниже, чем потенциал гема, расположенного вблизи Q_n -сайта, а в комплексе b_6f – наоборот. В результате перенос электрона в ходе Q-цикла в цитохромном b_6f -комплексе должен быть существенно затруднен по сравнению с комплексом bc_1 .

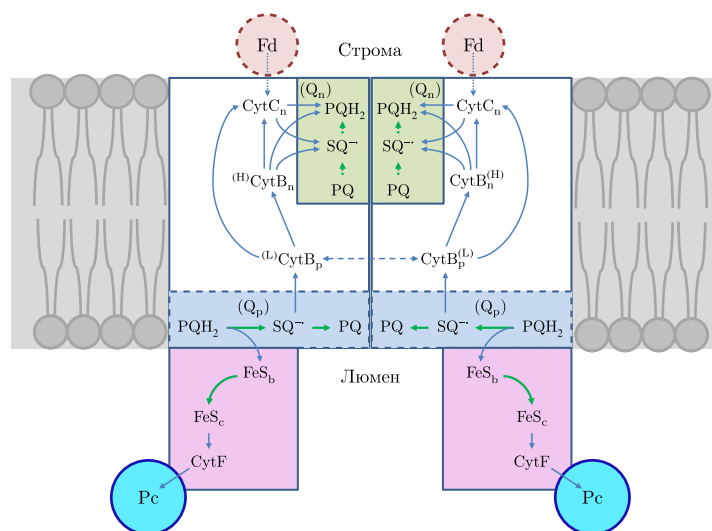


Рис. 2. Схема переноса электронов в цитохромном b_6f -комплексе. Q_p и Q_n – сайты связывания пластохинона, расположенные на люминальной (р) и стромальной (н) стороне комплекса, $CytB_p$ и $CytB_n$ – цитохромы с гемом b-типа, $CytC_n$ – цитохром с гемом c-типа, $CytF$ – цитохром f с гемом модифицированного c-типа, FeS – железосерный центр Риска, Fd – мобильный переносчик электрона ферредоксин, Pc – мобильный переносчик электрона пластацианин. В сайтах связывания пластохинона показаны стадии окисления и восстановления пластохинона от окисленного (PQ) до восстановленного (PQH_2) через промежуточное семихинонное состояние $SQ^{\cdot-}$. Для железосерного центра Риска индексами b и c показаны два его положения – вблизи Q_p -сайта и вблизи цитохрома f. Синими стрелками показаны реакции переноса электрона, направление стрелки соответствует преимущественному направлению реакции. Пунктирная стрелка показывает перенос электрона между гемами $CytB_p$, относящимися к разным мономерам в димере. Зелеными сплошными стрелками показаны перемещение железосерного центра Риска и молекулы пластохинона в Q_p -сайте. Серым показана тилакоидная мембрана. Малиновым фоном выделена часть комплекса, выступающая из тилакоидной мембраны в люмен

Современные представления о механизмах функционирования цитохромных комплексов bc_1 и b_6f подробно рассмотрены в обзорных статьях [Тихонов, 2023; Tikhonov, 2014; Tikhonov, 2024; Sarewicz et al., 2021]. Тем не менее на данный момент среди биологов нет полного понимания того, как именно функционирует b_6f -комплекс, поэтому при составлении математической модели мы постарались учесть все возможные реакции переноса электрона в этом комплексе (рис. 2). Имеющиеся данные о кинетических параметрах окислительно-восстановительных реакций, протекающих в цитохромном b_6f -комплексе, в основном относятся не

к элементарным реакциям переноса электрона в комплексе, а характеризуют суммарную реакцию окисления либо восстановления экзогенного донора либо акцептора электронов. Это обусловлено сложностью экспериментального исследования параметров этих реакций. В качестве редокс-центров в состав цитохромного b_6f -комплекса входят четыре гема с достаточно близкими спектральными характеристиками, что затрудняет определение редокс-состояния каждого из них оптическими методами. Исследование динамики состояний во времени также затруднено: в то время как для запуска процесса в фотосистемах 1 и 2 можно использовать вспышку света, запуск реакций в цитохромном комплексе возможен только за счет добавления экзогенных доноров и/или акцепторов электронов, из-за чего исследование наиболее быстрых процессов в эксперименте оказывается чрезвычайно сложным.

Вышеизложенное является причиной того, что все созданные ранее модели b_6f -комплекса были изначально упрощенными. Часть переносчиков априорно рассматривалась как находящиеся в быстром равновесии (например, железосерный центр Риске и гем f в работе Джалал Камали с соавторами [Камали и др., 2004] и гемы b_n и c_n в работе Д. Лазара [Lazár, 2009]), а окислительно-восстановительные реакции с участием мобильных переносчиков электрона рассматривались на основе формализма закона действующих масс как химические реакции второго порядка. Однако такое упрощение может привести к существенному искажению кинетики этих реакций, так как, в зависимости от концентрации мобильных переносчиков и степени восстановленности их пулов, лимитирующей скоростью стадией для этих реакций может быть как диффузионное сближение реагентов (и в таком случае кинетика реакции будет соответствовать реакции второго порядка), так и перенос электрона в уже образовавшемся комплексе, состоящем из цитохромного b_6f -комплекса и молекулы мобильного переносчика (что приведет к кинетике реакции первого порядка) или же отстыковка мобильного переносчика от комплекса (что также приводит к кинетике первого порядка). В связи с этим в данной работе мы отказались от упрощенного рассмотрения таких реакций и рассматриваем реакции с участием мобильных переносчиков электрона как трехстадийные.

Следует отметить, что в димере цитохромного b_6f -комплекса между мономерами образуется полость, которая может способствовать направленной диффузии пластохинонов между Q_p - и Q_n -сайтами. Полученные в 2023 году данные о структуре комплекса [Sarewicz et al., 2023] позволяют предположить, что сам Q_p -сайт также имеет сложную организацию и для осуществления реакций Q -цикла необходим перенос семипластохинона внутри канала, ведущего от внешнего края цитохромного комплекса к внутренней полости обмена хинонов. В данной работе мы принимали во внимание, что перенос электрона между пластогидрохиноном и железосерным центром Риске и между пластосемихиноном и цитохромом b_p происходит при разном расположении подвижного переносчика, однако в явном виде движение молекулы по каналу не рассматривали.

Параметры элементарных реакций в цитохромном b_6f -комплексе

Сопоставление имеющихся в литературе данных о константах скорости происходящих в цитохромном b_6f -комплексе реакций с конкретными элементарными реакциями затруднительно, а разброс опубликованных значений весьма значителен (таблица 1). В связи с этим в данной работе для оценки констант скорости элементарных реакций мы используем оценки, полученные на основе полученных в 2022–2023 годах данных [Szwalec et al., 2022; Sarewicz et al., 2023] о структуре цитохромного b_6f -комплекса и величине окислительно-восстановительных потенциалов входящих в его состав кофакторов.

К. Мозером и П. Даттоном [Moser, Dutton, 1992] на основе теории Маркуса предложена полуэмпирическая формула

$$\log k_{et} = 15 - 0,6R - \frac{3,1(\Delta G - \lambda)^2}{\lambda}, \quad (13)$$

Таблица 1. Расстояние R между донором и акцептором электрона, движущая сила реакции ΔG , константа равновесия реакции K , константы скорости прямой ($k_{пр}$) и обратной ($k_{обр}$) реакции переноса электрона между компонентами цитохромного b_6f -комплекса по данным различных источников и по оценкам, полученным в данной работе. Если не указано иное, расстояния приведены для структуры комплекса PDB ID: 7QRM [Sarewicz et al., 2023]. Полуужирным шрифтом выделены значения, использованные в данной работе. Pc — пластоцианин; Fd — ферредоксин; FeS_b и FeS_c — железосерный центр Риска пластохиноном в сближенной с Q_p -сайтом b-конформации и сближенной с гемом f c-конформации; $b_p(1)$ и $b_p(2)$ — гемы b_p двух мономеров в димере; $(Q^{\cdot-}/QH_2)_p$ — окисление пластогидрохинона до пластосемихинона в Q_p -сайте; $(Q/Q^{\cdot-})_{p1}$ — окисление пластосемихинона до пластохинона в гипотетическом положении, соответствующем его максимальному сближению с гемом b_p ; $(Q/Q^{\cdot-})_n$ и $(Q^{\cdot-}/QH_2)_n$ — двухстадийное восстановление пластохинона в Q_n -сайте

Донор	Акцептор	R , Å	ΔG , мэВ	K	$k_{пр}$, с ⁻¹	$k_{обр}$, с ⁻¹	Источник
$(Q^{\cdot-}/QH_2)_p$	FeS_b	7,2	+85	0,04 0,18 1	$4 \cdot 10^7$ 500 476 200 7850	10^9	оценка по формуле (13) [Камали и др., 2004] [#] [Демин, Вестерхофф, Холоденко, 1998] [#] [Hope et al., 1992] [#] [Berry, Rumberg, 2000] [#]
$(Q/Q^{\cdot-})_{p1}$	гем b_p	$\sim 14^{\&}$	-85	28 1,29 108 1	$8 \cdot 10^4$ 900 7668 650	3000	оценка по формуле (13) [Камали и др., 2004] [#] [Демин, Вестерхофф, Холоденко, 1998] [#] [Berry, Rumberg, 2000] [#]
гем c_n	$(Q/Q^{\cdot-})_n$	4,2	+210	$3 \cdot 10^{-4}$	$7 \cdot 10^8$	$2 \cdot 10^{12}$	оценка по формуле (13)
гем c_n	$(Q^{\cdot-}/QH_2)_n$	4,2	-340	$6 \cdot 10^5$	$8 \cdot 10^{11}$	10^6	оценка по формуле (13)
гем b_n	$(Q/Q^{\cdot-})_n$	9,5	+55	0,1 450 3,2 2,4 1,25	$6 \cdot 10^6$ 1500 $1,6 \cdot 10^4$ 407 2000	$5 \cdot 10^7$	оценка по формуле (13) [Камали и др., 2004] [#] [Демин, Вестерхофф, Холоденко, 1998] [#] [Hope et al., 1992] [#] [Berry, Rumberg, 2000] [#]
гем b_n	$(Q^{\cdot-}/QH_2)_n$	9,5	-495	$2 \cdot 10^8$ 5 5,07 1,25	10^9 1370 7605 2000	5	оценка по формуле (13) [Камали и др., 2004] [#] [Демин, Вестерхофф, Холоденко, 1998] [#] [Berry, Rumberg, 2000] [#]
FeS_c	гем f	$\sim 11^*$	-70	15	$4 \cdot 10^6$ 200	$3 \cdot 10^5$	оценка по формуле (13) [Soriano et al., 2002]
гем f	Pc	12,4	+30	0,3	$2 \cdot 10^5$ 3000 62 2,8 26	$5 \cdot 10^5$	оценка по формуле (13) [Soriano et al., 2002] [Modi et al., 1992] [Meyer et al., 1993] [Kannt, Young, Bendall, 1996]
гем b_p	гем b_n	12,9	+30	0,3 10 22,6 7 40	$8 \cdot 10^4$ 527 8224 7 10^5	$3 \cdot 10^5$ 2300	оценка по формуле (13) [Камали и др., 2004] [#] [Демин, Вестерхофф, Холоденко, 1998] [#] [Crofts, Wraight, 1983] [Hope et al., 1992] [#]
гем b_p	гем c_n	18,1	-125	130	500	4	оценка по формуле (13)
гем b_n	гем c_n	5,0	-155	400	$5 \cdot 10^{10}$	10^8	оценка по формуле (13)
гем $b_p(1)$	гем $b_p(2)$	16,0	0	1	1700	1700	оценка по формуле (13)
FeS_b	FeS_c	—	—	1	$8 \cdot 10^4$	$8 \cdot 10^4$	[Millett, Durham, 2004]
Fd	гем c_n	?	-475	10^8	?	?	оценка по формуле (13)

& — расстояние в гипотетическом положении, соответствующем максимальному сближению пластосемихинона с гемом b_p .

* — расстояние для структуры bc_1 комплекса PDB ID: 1BE3 [Iwata et al., 1998].

— значения для эффективной реакции, включающей пристыковку переносчика к комплексу и собственно перенос электрона.

Таблица 2. Средноточечные окислительно-восстановительные потенциалы φ редокс-центров цитохромного b_6f -комплекса и мобильных переносчиков электрона

Редокс-центр	φ , мВ	Источник
цитохромный b_6f -комплекс		
FeS	+300	[Sarewicz et al., 2021]
гем f	+370	[Szwalec et al., 2022]
гем b_p	–80	[Szwalec et al., 2022]
гем b_n	–110	[Szwalec et al., 2022]
гем c_n	+45	[Szwalec et al., 2022]
пластохинон		
$PQ^{\cdot-}/PQH_2$	+385	[Hauska al., 1983]
$PQ/PQ^{\cdot-}$	–165	[Hauska al., 1983]
ферредоксин	–430	[Batie, Kamin, 1981]
пластоцианин	+340	[Malkin, Knaff, Bearden, 1973]

где k_{et} — скорость переноса электрона, s^{-1} ; R — расстояние, Å; ΔG — движущая сила реакции, эВ; λ — энергия, необходимая для изменения ядерных координат при переходе от реагента к переходному состоянию (энергии внутрисферной реорганизации), эВ. Эта формула позволяет, зная расстояние между редокс-центрами, разность их окислительно-восстановительных потенциалов и энергию внутрисферной реорганизации, оценить константу скорости туннельного переноса электрона между ними. В данной работе значение параметра λ принимали равным 700 мэВ [Moser et al., 2006]. Движущую силу реакции рассчитывали исходя из средноточечных окислительно-восстановительных потенциалов (таблица 2).

Полученные по формуле (13) оценки констант скоростей также приведены в таблице 1. Следует отметить, что окислительно-восстановительные потенциалы пластохинона сильно зависят от его окружения. Приведенные в таблице 1 значения используют средноточечные потенциалы пластохинона, оцененные в липидном окружении, поэтому оценки констант скорости реакций с его участием следует расценивать как значительно более грубые по сравнению с остальными.

В настоящее время сайт связывания ферредоксина на цитохромном b_6f -комплексе неизвестен. Хотя распределение электростатических зарядов на стромальной поверхности комплекса очень похоже на распределение зарядов у других белков, получающих электроны от ферредоксина, прямая передача электронов между ферредоксином и цитохромным b_6f -комплексом не доказана. Предполагается, что важную роль во взаимодействии ферредоксина с цитохромным b_6f -комплексом могут играть белки семейства PGR (proton gradient regulation) Pgr5 и PgrL1 [Hertle et al., 2013; Munekage et al., 2002; DalCorso et al., 2008], однако структуру соответствующих комплексов установить пока не удалось. В данной работе мы исходили из предположения, что ферредоксин передает электроны на гем c_n цитохромного комплекса. Поскольку достоверные сведения о механизме и параметрах этой реакции отсутствуют, мы рассматривали перенос электрона как практически необратимую реакцию с константами скорости прямой и обратной реакции $10^5 s^{-1}$ и $10^{-3} s^{-1}$ соответственно (принимая во внимание константу равновесия реакции, рассчитанную исходя из окислительно-восстановительных потенциалов донора и акцептора электрона).

Оценка констант скорости пристыковки и отстыковки пластоцианина в модели основывается на экспериментальных данных по взаимодействию пластоцианина с растворимой формой цитохрома f [Hope, 2000; Kannt, Young, Bendall, 1996; Modi et al., 1992]. Параметры пристыковки и отстыковки ферредоксина были взяты по аналогии с пластоцианином, поскольку молекулярные массы и размеры этих белков близки между собой. Параметры биомолекулярного взаимодействия пластохинона с каждым из сайтов взяты по аналогии с параметрами взаимодействия

пластохинона с фотосистемой 2 [Lazár, 2003; Stiehl, Witt, 1969; Crofts et al., 1993]. Поскольку основное кинетическое уравнение записано для вероятностей нахождения комплекса в каждом из состояний, в модели использовали относительные концентрации мобильных переносчиков электрона, то есть отношение концентрации переносчика к концентрации цитохромного b_6f -комплекса. Соответственно, константы скорости для бимолекулярных реакций были нормированы исходя из концентрации цитохромного b_6f -комплекса 1 мМ [Antal et al., 2013]:

$$k_1 = k_2 \cdot [\text{cyt } b_6f], \quad (14)$$

где k_1 — нормированная константа скорости, с^{-1} ; k_2 — константа скорости реакции второго порядка, $\text{М}^{-1}\text{с}^{-1}$; $[\text{cyt } b_6f]$ — концентрация цитохромного b_6f -комплекса, М.

Модель перехода между состояниями цитохромного b_6f -комплекса

Общее число возможных состояний цитохромного b_6f -комплекса весьма велико и даже без явного рассмотрения реакций протонирования/депротонирования пластохинона составляет 9216 для мономера. Учет возможности переноса электрона между гемами b_p разных мономеров в димере (оценка константы скорости реакции — порядка $2 \cdot 10^3 \text{ с}^{-1}$) квадратично увеличивает число состояний — до почти 85 миллионов для димера. Соответствующий граф состояний и дифференциальные уравнения модели динамики состояний этого комплекса составлены на основе представленной на рис. 2 схемы реакций. Для генерации графа состояний и уравнений модели мы использовали пакет PySB [Lopez et al., 2013; Lopez, Garbett, 2014]. В данной работе мы рассматриваем модель мономера цитохромного b_6f . Переменными модели являются вероятности нахождения комплекса в каждом из 9216 состояний, а также концентрации окисленных и восстановленных мобильных переносчиков электрона. При ненулевых концентрациях окисленных и восстановленных форм мобильных переносчиков электрона граф состояний состоит из одной компоненты сильной связности.

Принимая во внимание размерность системы (9216 уравнений), нахождение решений уравнений (6') и (10) в аналитическом виде представляется невозможным. Нами разработано программное обеспечение, позволяющее в автоматическом режиме по заданной схеме элементарных реакций в комплексе сгенерировать функцию на языке программирования Python, принимающую в качестве параметров константы скорости элементарных реакций и концентрации окисленных и восстановленных форм мобильных переносчиков электрона и возвращающую матрицу соответствующего основного кинетического уравнения в численном виде. Для символьных операций с уравнениями используется пакет SymPy [Meurer et al., 2017].

Для нахождения квазистационарных состояний $\bar{\mathbf{p}}$ и для нахождения множителей $\mathbf{m}$ мы решали уравнения вида (6') и (10) с помощью функции `linalg.solve` пакета SciPy [Virtanen et al., 2020]. Эта функция использует для нахождения решения LU-факторизацию матрицы с помощью функций `dgetrf` и `dgetrs` пакета LAPACK [Anderson et al., 1999]. На тестовой системе с шестиядерным процессором i5-8600K, работающим на частоте 3,6 ГГц (Ubuntu 18.04, Python 3.10, SciPy 1.11.2 из дистрибутива Anaconda), поиск решения для одного набора параметров занимает примерно 4 с, при этом LAPACK полностью использует ресурсы всех ядер процессора. Для нахождения собственных векторов и собственных значений использовали функцию `linalg.eig` пакета SciPy, использующую функцию `dgeev` пакета LAPACK; вычисления на той же тестовой системе занимали в среднем 330 с. Для рассмотренной модели проведение вычислений в арифметике двойной точности позволяет получить решение с невязкой не более 10^{-3} при относительной концентрации каждого из мобильных переносчиков (как в окисленной, так и в восстановленной форме) 10^{-2} и выше. В дополнение к расчетам с двойной точностью разработанное программное обеспечение позволяет проводить расчеты с произвольной точностью с использованием пакетов `mpmath` [mpmath, 2023] или FLINT [FLINT, 2023; Johansson, 2024], однако время выполнения

расчета и требования к объему оперативной памяти в таком случае многократно возрастают. Так, нахождение решения уравнения (6') при 128-битной мантиссе с помощью пакета FLINT занимает 160 минут, а нахождение собственных векторов и собственных значений — около двух недель, при этом все вычисления ведутся в однопоточном режиме.

Функции отклика для потока электронов через цитохромный b_6f -комплекс

Для каждой из стадий переноса электрона в цитохромном b_6f -комплексе были определены векторы c_i , позволяющие по уравнению (12) рассчитать скорость электронного транспорта v_i на этом участке электрон-транспортной цепи. Однако для того, чтобы охарактеризовать квазистационарный поток электронов через цитохромный b_6f -комплекс, достаточно определить только три скорости потоков: скорость окисления пластохинона $\bar{v}_{PQ \rightarrow b_6f}$, скорость окисления ферредоксина $\bar{v}_{Fd \rightarrow b_6f}$ и скорость восстановления пластоцианина $\bar{v}_{b_6f \rightarrow Pc}$. Поскольку все реакции являются обратимыми, скорость каждого из этих потоков может быть отрицательной. Направления потоков выбраны таким образом, чтобы при большинстве рассматриваемых условий его скорость была положительной. Поскольку сумма входящих и исходящих потоков электронов равна нулю, $\bar{v}_{PQ \rightarrow b_6f} = \bar{v}_{b_6f \rightarrow Pc} - \bar{v}_{Fd \rightarrow b_6f}$. Для определения скорости потоков $\bar{v}_{b_6f \rightarrow Pc}$ и $\bar{v}_{Fd \rightarrow b_6f}$ мы использовали вектора коэффициентов для элементарных реакций переноса электрона между цитохромом f и пластоцианином $c_{b_6f \rightarrow Pc} = c_{cyt f \rightarrow Pc}$ и между ферредоксином и цитохромом $c_{Fd \rightarrow b_6f} = c_{Fd \rightarrow cyt c_n}$.

Зависимость квазистационарного потока электронов через цитохромный b_6f -комплекс от концентрации окисленных и восстановленных переносчиков электрона пластохинона, пластоцианина и ферредоксина

Проведен расчет значений скорости восстановления пластоцианина $\bar{v}_{b_6f \rightarrow Pc}$ и скорости окисления ферредоксина $\bar{v}_{Fd \rightarrow b_6f}$ при различных концентрациях окисленных и восстановленных форм мобильных переносчиков электрона. Полученные результаты показаны в виде линий равной скорости на рис. 3–5. Для большей наглядности на рис. 3 зависимость скорости восстановления пластоцианина $\bar{v}_{b_6f \rightarrow Pc}$ от концентрации окисленного (PQ) и восстановленного (PQH₂) пластохинона дополнительно показана в виде графиков. Для визуализации результатов моделирования использовали пакет matplotlib [Hunter, 2007; Caswell et al., 2021].

На рис. 3 показана зависимость скорости переноса электронов с пластохинона на пластоцианин через цитохромный b_6f -комплекс ($\bar{v}_{b_6f \rightarrow Pc}$) от концентрации мобильных переносчиков электрона. Можно видеть, что зависимость $\bar{v}_{b_6f \rightarrow Pc}$ от концентрации как окисленного, так и восстановленного пластохинона имеет немонокотонный характер: при низких концентрациях скорость возрастает при увеличении концентрации, а при высоких, наоборот, убывает. Уменьшение концентрации окисленного пластоцианина с 3 до 1 (рис. 3, *г*) не приводит к изменению скорости электронного транспорта, что согласуется с представлениями о том, что взаимодействие с пластоцианином не является лимитирующей стадией работы цитохромного b_6f -комплекса. Добавление окисленного ферредоксина (рис. 3, *б*) также не изменяет скорость переноса электронов на пластоцианин. В то же время добавление восстановленного ферредоксина (рис. 3, *в*) приводит к небольшому снижению скорости переноса электронов на пластоцианин. Это связано с тем, что появление дополнительного донора электронов, передающего электроны в низкопотенциальную цепь цитохромного b_6f -комплекса (гемы b_p , b_n и c_n), препятствует окислению пластосемихинона в Q_p-сайте и за счет этого тормозит перенос электронов по высокопотенциальной цепи.

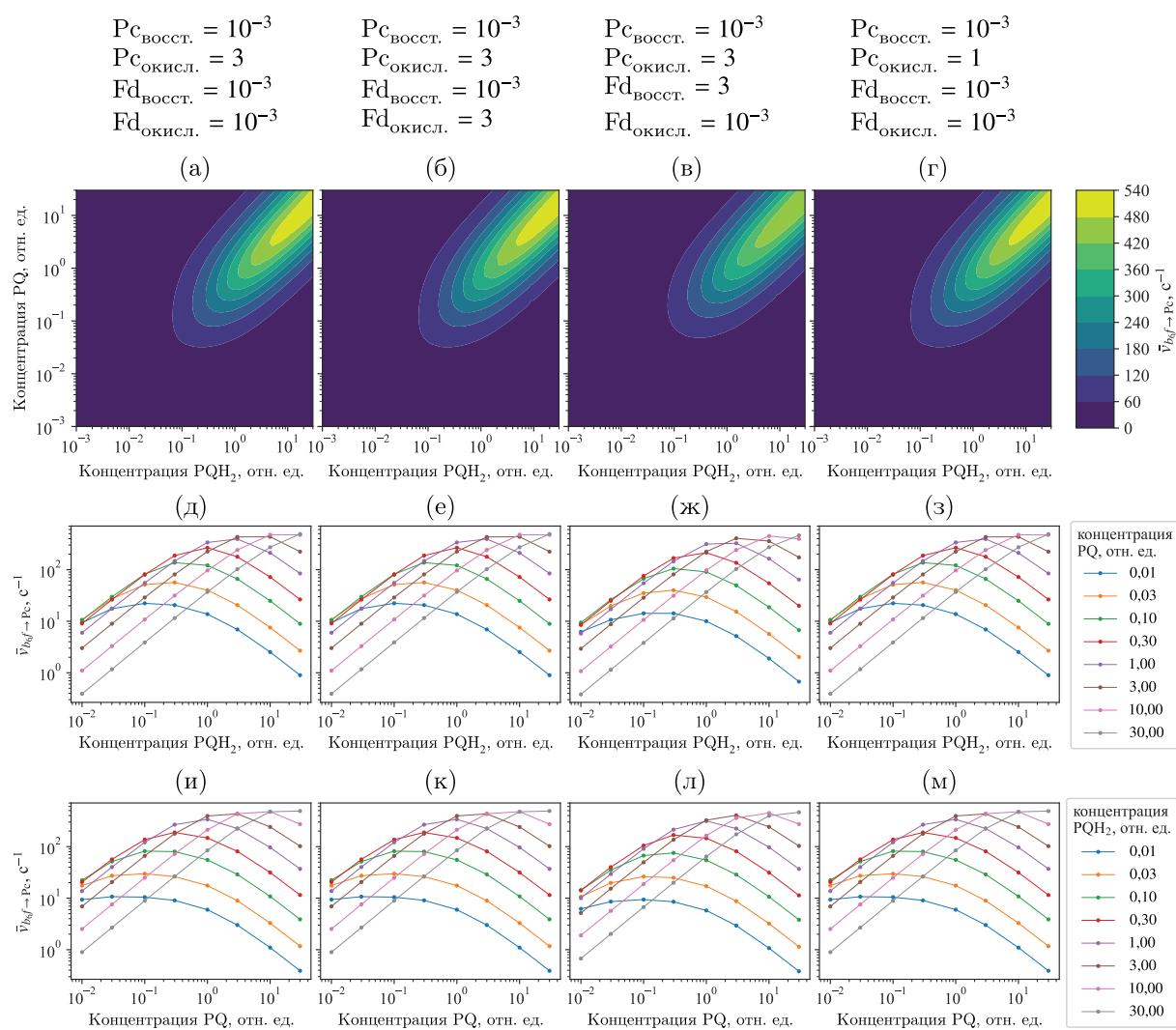


Рис. 3. Зависимость скорости восстановления пластоцианина цитохромным b_6f -комплексом $\bar{v}_{b_6f \rightarrow Pc}$ от концентрации окисленного (PQ) и восстановленного (PQH_2) пластохинона. На панелях *a–c* показаны линии равной скорости, на панелях *d–z* — графики зависимости $\bar{v}_{b_6f \rightarrow Pc}$ от концентрации PQH_2 при фиксированной концентрации PQ, на панелях *и–м* — графики зависимости $\bar{v}_{b_6f \rightarrow Pc}$ от концентрации PQ при фиксированной концентрации PQH_2 . Концентрация восстановленного пластоцианина $Pc_{восст.}$ 10^{-3} (все панели); окисленного пластоцианина $Pc_{окисл.}$ 3 (*a–в*, *д–ж*, *и–л*), 1 (*з*, *з*, *м*); восстановленного ферредоксина $Fd_{восст.}$ 10^{-3} (*a*, *б*, *з–е*, *з–к*), 3 (*в*, *ж*, *л*); окисленного ферредоксина $Fd_{окисл.}$ 10^{-3} (*a*, *в–д*, *ж–и*, *л*, *м*), 3 (*б*, *е*, *к*). Все концентрации нормированы на концентрацию цитохромных b_6f -комплексов

Зависимость скорости переноса электронов с ферредоксина на пластохинон ($\bar{v}_{Fd \rightarrow b_6f}$) от концентрации мобильных переносчиков электрона (рис. 4) монотонная: увеличение концентрации восстановленного ферредоксина или окисленного пластохинона приводит к увеличению скорости транспорта. При наличии окисленного пластоцианина добавление восстановленного пластохинона снижает скорость окисления ферредоксина при низкой концентрации окисленного пластохинона, однако практически не влияет на эту скорость (и может даже несколько увеличивать относительной ее) при концентрации окисленного пластохинона от 2 и выше (рис. 4, *a–в*). Если окисленный пластоцианин отсутствует, то вызванное добавлением восстановленного пластохинона снижение скорости окисления ферредоксина оказывается менее выражен-

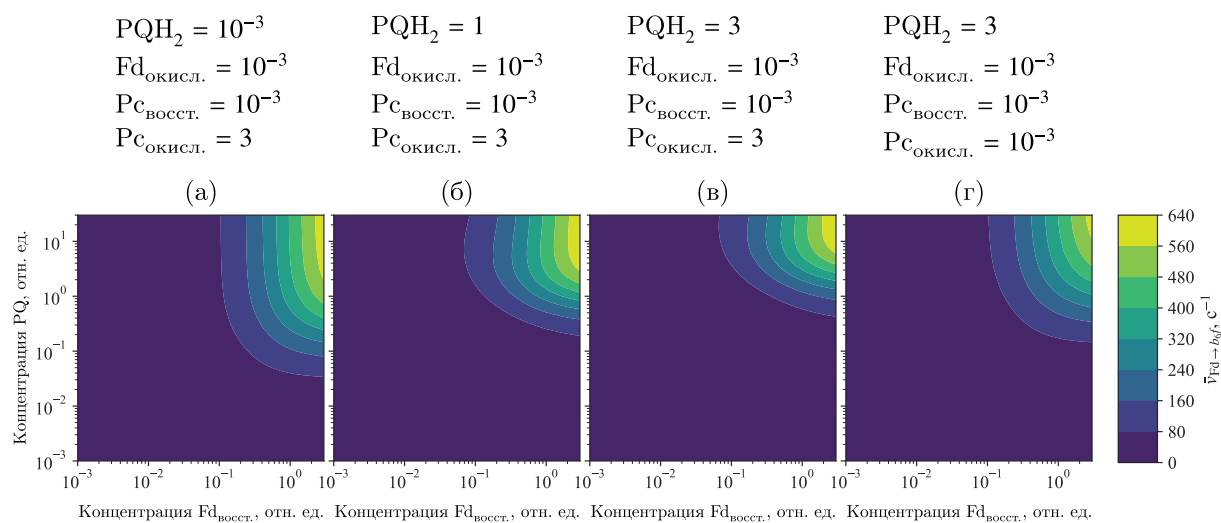


Рис. 4. Линии равных скоростей для зависимости скорости окисления ферредоксина цитохромным b_6f -комплексом $\bar{v}_{\text{Fd} \rightarrow b_6f}$ от концентрации окисленного пластохинона (PQ) и восстановленного ферредоксина ($\text{Fd}_{\text{восст.}}$). Концентрация восстановленного пластохинона $\text{PQH}_2 = 10^{-3}$ (а), 1 (б), 3 (в, г); окисленного ферредоксина $\text{Fd}_{\text{окисл.}} = 10^{-3}$ (все панели); восстановленного пластоцианина $\text{Pc}_{\text{восст.}} = 10^{-3}$ (все панели), окисленного пластоцианина $\text{Pc}_{\text{окисл.}} = 3$ (а–в), $\text{Pc}_{\text{окисл.}} = 10^{-3}$ (г). Все концентрации нормированы на концентрацию цитохромных b_6f -комплексов

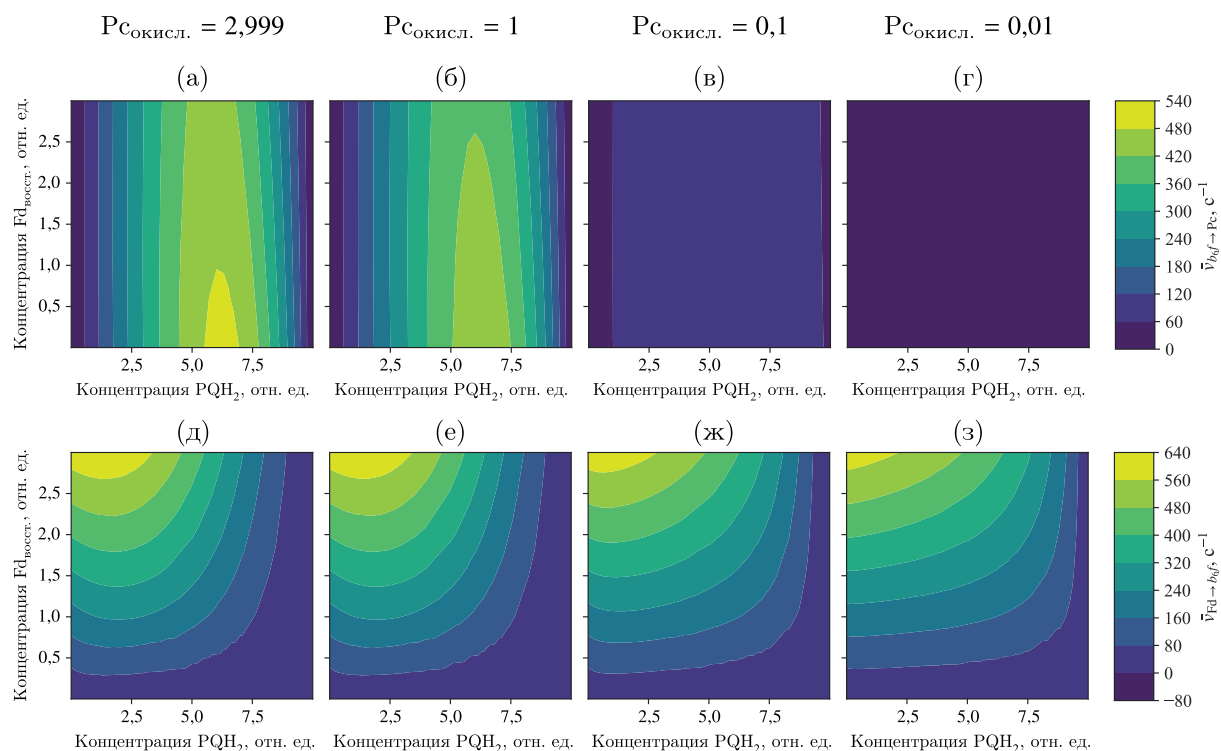


Рис. 5. Линии равных скоростей для зависимости скоростей восстановления пластоцианина $\bar{v}_{b_6f \rightarrow \text{Pc}}$ (а–г) и окисления ферредоксина $\bar{v}_{\text{Fd} \rightarrow b_6f}$ (д–з) цитохромным b_6f -комплексом от концентрации окисленного пластохинона (PQ) и восстановленного ферредоксина ($\text{Fd}_{\text{восст.}}$) при постоянной суммарной концентрации окисленных и восстановленных форм переносчиков электрона в каждом из пулов: $\text{PQ} + \text{PQH}_2 = 10$, $\text{Fd}_{\text{восст.}} + \text{Fd}_{\text{окисл.}} = 3$, $\text{Pc}_{\text{восст.}} + \text{Pc}_{\text{окисл.}} = 3$. Концентрация окисленного пластоцианина $\text{Pc}_{\text{окисл.}}$ 3 (а, д), 1 (б, е), 0,1 (в, ж) и 0,01 (г, з). Все концентрации нормированы на концентрацию цитохромных b_6f -комплексов

ным (рис. 4, ε), что указывает на конкуренцию электронного потока от ферредоксина с потоком Q-цикла.

На рис. 5 показана зависимость скорости электронного транспорта через цитохромный b_6f -комплекс с пластохинона на пластоцианин ($\bar{v}_{b_6f \rightarrow PC}$, панели $a-\varepsilon$) и с ферредоксина на пластохинон ($\bar{v}_{Fd \rightarrow b_6f}$, панели $\delta-\varepsilon$) от степени восстановленности пулов пластохинона, ферредоксина и пластоцианина. Размер пула пластохинонов принят равным 10 молекулам на один b_6f -комплекс, размеры пулов пластоцианина и ферредоксина — по три молекулы на один b_6f -комплекс, что приблизительно соответствует соотношению количества этих переносчиков к количеству цитохромных b_6f -комплексов у высших растений [Antal et al., 2013]. Можно видеть, что максимальная скорость восстановления пластоцианина достигается, когда пул пластохинонов восстановлен приблизительно на 60 %. Восстановление пластоцианина практически полностью прекращается, при степени восстановленности пула пластохинонов меньше 10 % и больше 95 %. В условиях, когда большая часть молекул пластоцианина восстановлена, наблюдается некоторое увеличение скорости восстановления пластохинона за счет окисления ферредоксина.

Моделирование переходного процесса в цитохромном b_6f -комплексе при изменении степени восстановленности пула пластохинонов

Проведено моделирование переходных процессов в цитохромном b_6f -комплексе при изменении степени восстановленности пула пластохинонов. При моделировании предполагалось, что изменение концентрации не связанных с комплексом окисленных и восстановленных форм пластохинона происходит скачкообразно в нулевой момент времени. Состояние связанных с цитохромным комплексом молекул пластохинона при этом соответствует состоянию равновесия с пулом в начальном состоянии.

Показано (рис. 6, $a-\varepsilon$), что при увеличении восстановленности пула пластохинонов с 0,1 % уже на первой наносекундных временах начинается окисление пластохинона в Q_p -сайте, однако вплоть до микросекундных времен скорость его окисления невысока. Скорость окисления пластохинона достигает своего максимума через одну или несколько микросекунд после увеличения степени восстановленности пула, после чего наблюдается снижение скорости к стационарной скорости потока, соответствующей этим условиям. Установление стационарной скорости происходит через 10 мс после увеличения степени восстановленности пула. Максимальная скорость окисления увеличивается с увеличением степени восстановленности пула, ее величина при увеличении восстановленности пула пластохинонов с 0,1 % до 60 % примерно на 20 % больше стационарной скорости потока, соответствующей 60 %-й восстановленности пула. Рост скорости переноса электрона с железосерного центра Риска на цитохром f начинается позже — на 100 мкс, однако уже к 1 мс эта скорость становится равной скорости окисления пластохинона. Характерное время увеличения скорости восстановления пластоцианина составляет около 1 мс после увеличения восстановленности пула. После достижения максимума все скорости постепенно уменьшаются и к 10 мс достигают стационарного уровня.

Процессы в низкопотенциальной ветви электронного транспорта (рис. 6, $\delta-\varepsilon$) имеют близкие характерные времена. Характерное время нарастания скорости окисления пластосемихинона в Q_p -сайте составляет порядка 100 мкс. Немного быстрее начинается окисление пластохинона в Q_n -сайте (характерное время — около 10 мкс). После 100 мкс окисление пластохинона в Q_n -сайте сменяется его восстановлением, характерным для нормального режима функционирования Q-цикла. На графике показана суммарная скорость переноса двух электронов между цитохромами b_n и c_n и пластохиноном в Q_n -сайте, поскольку кривые для пластохинона и пластосемихинона полностью совпадают.

При уменьшении восстановленности пула пластохинонов скорости процессов в высокопотенциальной ветви электронного транспорта изменяются монотонно с характерными временами

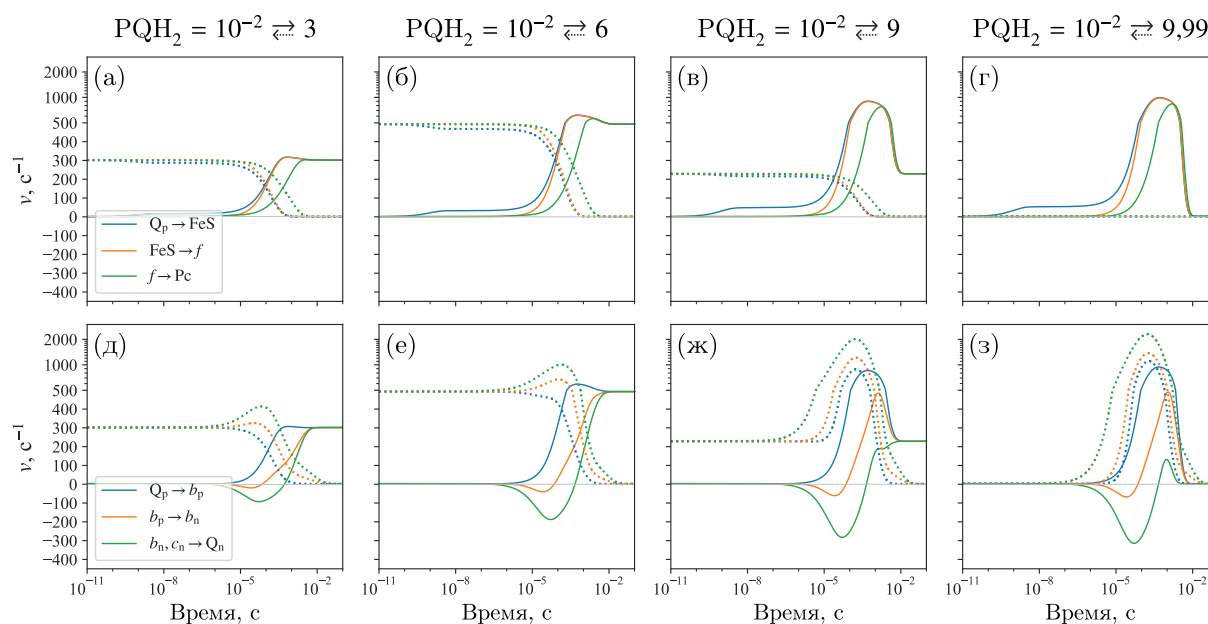


Рис. 6. Динамика изменения скорости отдельных стадий электронного транспорта в высокопотенциальной (а–г) и низкопотенциальной (д–з) ветвях цитохромного b_6f -комплекса в ответ на изменение степени восстановленности пула пластохинонов: с 0,1 % до 30 % (а, д, сплошные линии), с 0,1 % до 60 % (б, е, сплошные линии), с 0,1 % до 90 % (в, ж, сплошные линии), с 0,1 % до 99,9 % (г, з, сплошные линии), с 30 % до 0,1 % (а, д, пунктирные линии), с 60 % до 0,1 % (б, е, пунктирные линии), с 90 % (в, ж, пунктирные линии), с 99,9 % до 0,1 % (г, з, пунктирные линии). Суммарная концентрация окисленных и восстановленных форм пластохинона в пуле: $PQ + PQH_2 = 10$. Концентрация ферредоксина: восстановленного — $Fd_{\text{восст.}} = 0,01$, окисленного — $Fd_{\text{окисл.}} = 2,99$; концентрация пластоцианина: восстановленного — $Pc_{\text{восст.}} = 0,01$, окисленного — $Pc_{\text{окисл.}} = 2,99$. Значения скорости выше 500 s^{-1} приведены в логарифмическом масштабе

порядка 100 мс. Однако в низкопотенциальной ветви ситуация отличается: через 100 мс после уменьшения восстановленности пула скорости достигают своего максимума, после чего начинают снижаться к стационарным значениям.

Кинетические параметры реакций таковы, что время жизни пластосемихинона в Q_n -сайте очень мало, и его накопление не происходит. Это можно видеть на рис. 7, на котором показана динамика содержания разных форм пластохинона в Q_p - и Q_n -сайтах в ходе переходных процессов с разными начальными и конечными условиями. Ни в стационарном состоянии, ни в ходе переходных процессов содержание пластосемихинона в Q_n -сайте не отличается заметно от нуля (рис. 7, д–з). В то же время в Q_p -сайте увеличение восстановленности пула приводит к накоплению семихинон-радикала. Так, при восстановленности пула хинонов 60 %, соответствующей максимальной скорости переноса электронов на пластоцианин, содержание пластосемихинона достигает 19 % (рис. 7, б). Это согласуется с данными спектроскопии электронного парамагнитного резонанса [Sarewicz et al., 2017], указывающими на образование пластосемихинона в Q_p -сайте при нормальном функционировании цитохромного b_6f -комплекса. Эксперименты показали, что образующийся пластосемихинон находится в спиновом сопряжении с восстановленным железосерным кластером, что способствует его стабилизации. При максимальной восстановленности пула модель предсказывает увеличение содержания пластосемихинона до почти 100 %, что является крайне маловероятным, поскольку семихинон-радикал обладает высокой неспецифической реакционной активностью. Полное восстановление пула приводит к восстановлению низкопотенциальной ветви электронного транспорта в цитохромном b_6f -комплексе

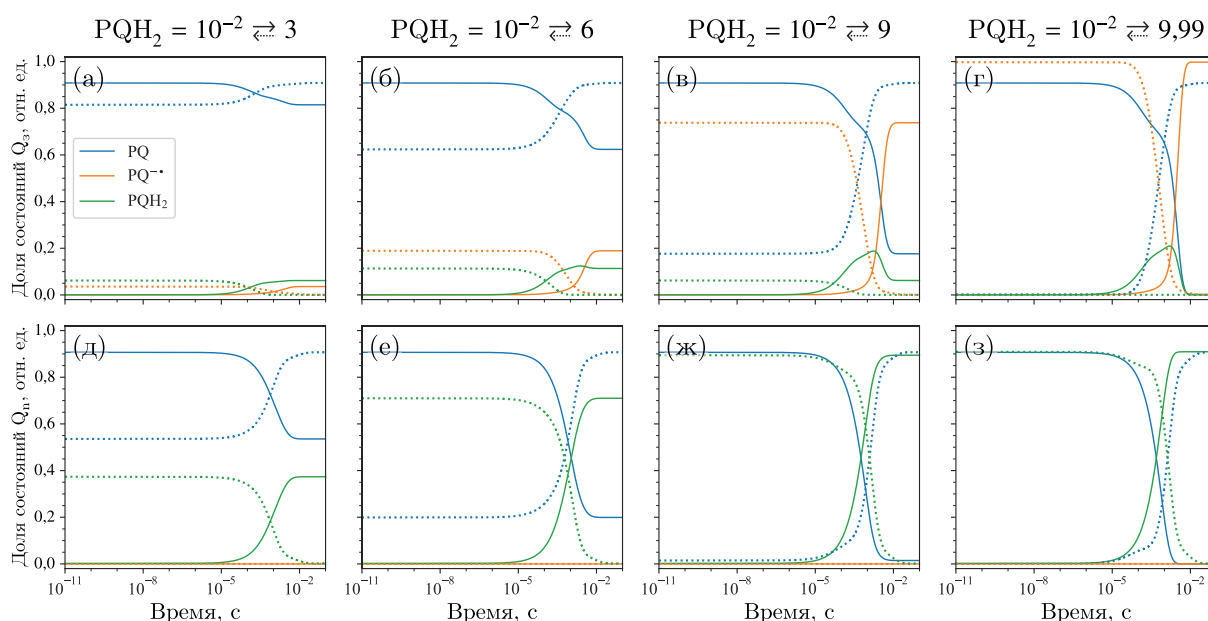


Рис. 7. Динамика содержания пластохинона в окисленном состоянии (PQ, синий), в состоянии семихинона ($PQ^{\bullet-}$, оранжевый) и в восстановленном состоянии (PQH_2 , зеленый) в сайтах связывания Q_p (a–d) и Q_n (e–h) цитохромного b_6f -комплекса в ходе переходного процесса, вызванного изменением степени восстановленности пула пластохинонов: с 0,1 % до 30 % (a, d, сплошные линии), с 0,1 % до 60 % (б, e, сплошные линии), с 0,1 % до 90 % (в, ж, сплошные линии), с 0,1 % до 99,9 % (г, з, сплошные линии), с 30 % до 0,1 % (a, d, пунктирные линии), с 60 % до 0,1 % (б, e, пунктирные линии), с 90 % (в, ж, пунктирные линии), с 99,9 % до 0,1 % (г, з, пунктирные линии). Суммарная концентрация окисленных и восстановленных форм пластохинона в пуле: $PQ + PQH_2 = 10$. Концентрация ферредоксина: восстановленного — $Fd_{\text{восст.}} = 0,01$, окисленного — $Fd_{\text{окисл.}} = 2,99$; концентрация пластоцианина: восстановленного — $Pc_{\text{восст.}} = 0,01$, окисленного — $Pc_{\text{окисл.}} = 2,99$

и, следовательно, невозможности переноса электрона с пластосемихинона на гем b_p . В таких условиях пластосемихинон должен взаимодействовать с молекулярным кислородом с образованием супероксидного анион-радикала [Baniulis et al., 2013; Rutherford, Osyczka, Rappaport, 2012], поэтому для корректного воспроизведения состояний цитохромного b_6f -комплекса в модели необходимо учитывать эту реакцию.

Заключение

Предложен основанный на методах линейной алгебры подход к анализу скорости электронного транспорта через цитохромный b_6f -комплекс. Зависимость квазистационарного потока электронов через комплекс от степени восстановленности пулов мобильных переносчиков электрона рассматривается как функция отклика, характеризующая этот процесс. Разработано программное обеспечение на языке программирования Python, позволяющее построить основное кинетическое уравнение для комплекса по схеме элементарных реакций и вычислить квазистационарные скорости электронного транспорта через комплекс и динамику их изменения в ходе переходного процесса. Вычисления проводятся в многопоточном режиме, что позволяет эффективно использовать ресурсы современных вычислительных систем и за сравнительно небольшое время получать данные о функционировании комплекса в широком диапазоне параметров. Разработанное программное обеспечение доступно в качестве дополнительной информации к статье, является свободно распространяемым и может быть использовано на условиях лицензии GPL версии 3 [Free Software Foundation, 2007].

Для параметризации модели цитохромного b_6f -комплекса использованы взятые из литературы данные криоэлектронной микроскопии и окислительно-восстановительного титрования. Несмотря на то что полученные таким образом оценки констант скорости элементарных реакций являются весьма приблизительными, результаты моделирования находятся в хорошем согласовании с имеющимися экспериментальными данными: максимальная стационарная скорость переноса электронов на пластоцианин в модели составляет около 500 с^{-1} , в то время как экспериментальные оценки указывают на скорость в несколько сот (но не более 1000) электронов в секунду (см. обзор [Sarewicz et al., 2021]). Тем не менее с точки зрения биологии и физической химии разработанную модель следует рассматривать лишь в качестве простейшего подтверждения применимости предложенного математического подхода. Это связано с тем, что в модели не учитывается один из основных аспектов функционирования цитохромного b_6f -комплекса — его участие в транспорте протонов из стромы хлоропласта в люмен тилакоидов, что чрезвычайно важно для синтеза АТФ. Реакции протонирования и депротонирования пластохинона тесно сопряжены с окислительно-восстановительными реакциями и могут оказывать значительное влияние на скорость электронного транспорта через цитохромный b_6f -комплекс [Устынюк, Тихонов, 2022]. В рамках предложенного подхода схема реакций модели может быть легко расширена для явного учета протонирования и депротонирования пластохинона и перемещения пласто-семихинона в Q_p -сайте, однако корректная параметризация этих реакций может потребовать дополнительных исследований.

Предложенный подход может быть легко адаптирован для анализа электронного транспорта в других компонентах фотосинтетической и дыхательной электрон-транспортной цепи, а также других процессов в сложных мультиферментных комплексах, содержащих несколько реакционных центров. В дальнейшем мы планируем, используя предложенный подход, разработать модели остальных компонентов фотосинтетической электрон-транспортной цепи и использовать разработанные модели в качестве компонентов детальной модели электронного транспорта в тилакоидах хлоропластов. При расчете стационарной скорости электронного транспорта в интегральной модели детальные модели отдельных комплексов могут быть заменены на соответствующие функции отклика, что приведет к существенному ускорению вычислений. Другим важным применением предложенной модели представляется ее использование для анализа чувствительности максимальной скорости электронного транспорта через цитохромный b_6f -комплекс к изменению параметров элементарных реакций. Проведение такого анализа позволит лучше понять механизм функционирования этого комплекса.

Список литературы (References)

- Демин О. В., Вестерхофф Х. В., Холоденко Б. Н. Математическое моделирование процессов генерации супероксида bc_1 комплексом митохондрий // Биохимия. — 1998. — Т. 63, вып. 6. — С. 755–772.
- Demin O. V., Westerhoff H. V., Kholodenko B. N. Mathematical modelling of superoxide generation with the bc_1 complex of mitochondria // Biochemistry (Moscow). — 1998. — Vol. 63, No. 6. — P. 634–649. (Original Russian paper: Demin O. V., Vesterkhoff Kh. V., Kholodenko B. N. Matematicheskoe modelirovanie protsessov generatsii superoksida bc_1 kompleksom mitokhondrii // Biokhimiya. — 1998. — Vol. 63, No. 6. — P. 755–772.)
- Камали М. Д., Лебедева Г. В., Демин О. В., Беляева Н. Е., Ризниченко Г. Ю., Рубин А. Б. Кинетическая модель цитохромного bf -комплекса. Оценка кинетических параметров // Биофизика. — 2004. — Т. 49, № 6. — С. 1061–1068.
- Kamali M. J., Lebedeva G. V., Demin O. V., Beliaeva N. E., Rznichenko G. Yu., Rubin A. B. Kineticheskaya model' tsitokhromnogo bf -kompleksa. Otsenka kineticheskikh parametrov [A kinetic model of the cytochrome bf -complex. Evaluation of kinetic parameters] // Biofizika. — 2004. — Vol. 49, No. 6. — P. 1061–1068 (in Russian).
- Ризниченко Г. Ю., Беляева Н. Е., Коваленко И. Б., Антал Т. К., Горячев С. Н., Маслаков А. С., Плюснина Т. Ю., Федоров В. А., Хрущев С. С., Яковлева О. В., Рубин А. Б. Математическое моделирование электронного транспорта в первичных процессах фотосинтеза // Биохимия. — 2022. — Т. 87, № 10. — С. 1350–1371. — DOI: 10.31857/S0320972522100037

- Riznichenko G. Yu., Belyaeva N. E., Kovalenko I. B., Antal T. K., Goryachev S. N., Maslakov A. S., Plyusnina T. Yu., Fedorov V. A., Khrushev S. S., Yakovleva O. V., Rubin A. B.* Mathematical simulation of electron transport in the primary photosynthetic processes // *Biochemistry (Moscow)*. — 2022. — Vol. 87, No. 10. — P. 1065–1083. (Original Russian paper: *Riznichenko G. Yu., Belyaeva N. E., Kovalenko I. B., Antal T. K., Goryachev S. N., Maslakov A. S., Plyusnina T. Yu., Fedorov V. A., Khrushev S. S., Yakovleva O. V., Rubin A. B.* Matematicheskoe modelirovanie elektronogo transporta v pervichnykh protsessakh fotosinteza // *Biokhimiya*. — 2022. — Vol. 87, No. 10. — P. 1350–1371.)
- Тихонов А. Н.* Электронный транспорт в хлоропластах: регуляция и альтернативные пути переноса электронов // *Биохимия*. — 2023. — Т. 88, № 10. — С. 1742–1760. — DOI: 10.31857/S0320972523100032
- Tikhonov A. N.* Elektronnyi transport v khloroplastakh: regulatsiya i al'ternativnye puti perenosa elektronov [Electron transport in chloroplasts: regulation and alternative pathways of electron transfer] // *Biokhimiya*. — 2023. — Vol. 88, No. 10. — P. 1742–1760 (in Russian).
- Устынюк Л. Ю., Тихонов А. Н.* Окисление пластохинола — лимитирующая стадия в цепи переноса электронов в хлоропластах // *Биохимия*. — 2022. — Т. 87, вып. 10. — С. 1372–1387.
- Ustynyuk L. Yu., Tikhonov A. N.* Plastoquinol oxidation: rate-limiting stage in the electron transport chain of chloroplasts // *Biochemistry (Moscow)*. — 2022. — Vol. 87, No. 10. — P. 1084–1097. — DOI: 10.1134/S0006297922100029 (Original Russian paper: *Ustynyuk L. Yu., Tikhonov A. N.* Okislenie plastokhinola — limitiruyushchaya stadiya v tsepi perenosa elektronov v khloroplastakh // *Biokhimiya*. — 2022. — Vol. 87, No. 10. — P. 1372–1387.)
- Albertson P.-A.* A quantitative model of the domain structure of the photosynthetic membrane // *Trends in Plant Science*. — 2001. — Vol. 6, No. 8. — P. 349–354. — DOI: 10.1016/s1360-1385(01)00201-0
- Anderson E., Bai Z., Bischof C., Blackford S., Demmel J., Dongarra J., Du Croz J., Greenbaum A., Hammarling S., McKenney A., Sorensen D.* LAPACK Users' Guide (Third). — Philadelphia, PA: Society for Industrial and Applied Mathematics, 1999.
- Antal T. K., Kovalenko I. B., Rubin A. B., Tyystjärvi E.* Photosynthesis-related quantities for education and modeling // *Photosynthesis Research*. — 2013. — Vol. 117. — P. 1–30. — DOI: 10.1007/s11120-013-9945-8
- Baniulis D., Hasan S. S., Stofleth J. T., Cramer W. A.* Mechanism of enhanced superoxide production in the cytochrome b6f complex of oxygenic photosynthesis // *Biochemistry*. — 2013. — Vol. 52, No. 50. — P. 8975–8983. — DOI: 10.1021/bi4013534
- Batie C. J., Kamin H.* The relation of pH and oxidation-reduction potential to the association state of the ferredoxin. ferredoxin: NADP+ reductase complex // *Journal of biological chemistry*. — 1981. — Vol. 256, No. 15. — P. 7756–7763. — DOI: 10.1016/S0021-9258(18)43341-8
- Berry S., Rumberg B.* Kinetic modeling of the photosynthetic electron transport chain // *Bioelectrochemistry*. — 2000. — Vol. 53, No. 1. — P. 35–53. — DOI: 10.1016/S0302-4598(00)00108-2
- Blankenship R. E., Tiede D. M., Barber J., Brudvig G. W., Fleming G., Ghirardi M., Gunner M. R., Junge W., Kramer D. M., Melis A., Moore T. A.* Comparing photosynthetic and photovoltaic efficiencies and recognizing the potential for improvement // *Science*. — 2011. — Vol. 332 (6031). — P. 805–809. — DOI: 10.1126/science.1200165
- Caswell T. A., Droettboom M., Lee A., Hunter J., Firing E., Sales De Andrade E., Hoffmann T., Stansby D., Klymak J., Varoquaux N., Hedegaard Nielsen J.* matplotlib/matplotlib: REL: v3.3.1. — Zenodo, 2021. — DOI: 10.5281/zenodo.592536
- Crofts A. R., Baroli I., Kramer D., Taoka S.* Kinetics of electron transfer between Q_A and Q_B in wild type and herbicide-resistant mutants of *Chlamydomonas reinhardtii* // *Zeitschrift für Naturforschung C*. — 1993. — Vol. 48, No. 3–4. — P. 259–266. — DOI: 10.1515/znc-1993-3-423
- Crofts A. R., Wraight C. A.* The electrochemical domain of photosynthesis // *Biochimica et Biophysica Acta (BBA) – Reviews on Bioenergetics*. — 1983. — Vol. 726, No. 3. — P. 149–185. — DOI: 10.1016/0304-4173(83)90004-6

- DalCorso G., Pesaresi P., Masiero S., Aseeva E., Schünemann D., Finazzi G., Joliot P., Barbato R., Leister D.* A complex containing PGRL1 and PGR5 is involved in the switch between linear and cyclic electron flow in *Arabidopsis* // *Cell*. — 2008. — Vol. 132. — P. 273–285. — DOI: 10.1016/j.cell.2007.12.028
- Fernengel B., Drossel B.* Obtaining the long-term behavior of master equations with finite state space from the structure of the associated state transition network // *J. Phys. A: Math. Theor.* — 2022. — Vol. 55, No. 11. — P. 115201. — DOI: 10.1088/1751-8121/ac515f
- Finazzi G., Minagawa J., Johnson G.N.* The cytochrome b6f complex: a regulatory hub controlling electron flow and the dynamics of photosynthesis? // *Cytochrome complexes: evolution, structures, energy transduction, and signaling*. — Springer, 2016. — P. 437–452.
- FLINT: Fast Library for Number Theory. Version 3.0.0. — 2023. — [Electronic resource]. — <https://flintlib.org/> (accessed: 21.05.2024).
- Free Software Foundation, Inc. GNU General Public License, version 3. — 2007. — [Electronic resource]. — <https://www.gnu.org/licenses/gpl-3.0.html> (accessed: 21.05.2024).
- Hauska G., Hurt E., Gabellini N., Lockau W.* Comparative aspects of quinol-cytochrome c/plastocyanin oxidoreductases // *Biochimica et Biophysica Acta (BBA) – Reviews on Bioenergetics*. — 1983. — Vol. 726, No. 2. — P. 97–133. — DOI: 10.1016/0304-4173(83)90002-2
- Hertle A.P., Blunder T., Wunder T., Pesaresi P., Pribil M., Armbruster U., Leister D.* PGRL1 is the elusive ferredoxin-plastoquinone reductase in photosynthetic cyclic electron flow // *Molecular Cell*. — 2013. — Vol. 49. — P. 511–523. — DOI: 10.1016/j.molcel.2012.11.030
- Hill T.L.* Studies in irreversible thermodynamics IV. Diagrammatic representation of steady state fluxes for unimolecular systems // *Journal of Theoretical Biology*. — 1966. — Vol. 10, No. 3. — P. 442–459. — DOI: 10.1016/0022-5193(66)90137-8
- Hope A.B.* Electron transfers amongst cytochrome f, plastocyanin and photosystem I: kinetics and mechanisms // *Biochimica et Biophysica Acta (BBA) – Bioenergetics*. — 2000. — Vol. 1456, No. 1. — P. 5–26. — DOI: 10.1016/S0005-2728(99)00101-2
- Hope A.B., Huilgol R.R., Panizza M., Thompson M., Matthews D.B.* The flash-induced turnover of cytochrome b-563, cytochrome f and plastocyanin in chloroplasts. Models and estimation of kinetic parameters // *Biochimica et Biophysica Acta (BBA) – Bioenergetics*. — 1992. — Vol. 1100, No. 1. — P. 15–26. — DOI: 10.1016/0005-2728(92)90121-H
- Hunter J.D.* Matplotlib: A 2D graphics environment // *Computing in science & engineering*. — 2007. — Vol. 9, No. 03. — P. 90–95. — DOI: 10.1109/MCSE.2007.55
- Iwata S., Lee J.W., Okada K., Lee J.K., Iwata M., Rasmussen B., Link T.A., Ramaswamy S., Jap B.K.* Complete structure of the 11-subunit bovine mitochondrial cytochrome bc1 complex // *Science*. — 1998. — Vol. 281 (5373). — P. 64–71. — DOI: 10.1126/science.281.5373.64
- Johansson F.* Python-FLINT: Python extension module wrapping FLINT and Arb. — 2024. — [Electronic resource]. — <https://fredrikj.net/python-flint/> (accessed: 21.05.2024).
- Johnson M.P., Vasilev C., Olsen J.D., Hunter C.N.* Nanodomains of cytochrome b6f and photosystem II complexes in spinach grana thylakoid membranes // *The Plant Cell*. — 2014. — Vol. 26, No. 7. — P. 3051–3061. — DOI: 10.1105/tpc.114.127233
- Kalaji H.M., Schansker G., Brestic M., Bussotti F., Calatayud A., Ferroni L., Goltsev V., Guidi L., Jajoo A., Li P., Losciale P., Mishra V.K., Misra A.N., Nebauer S.G., Pancaldi S., Penella C., Pollastrini M., Suresh K., Tambussi E., Yannicari M., Zivcak M., Cetner M.D., Samborska I.A., Stirbet A., Olsovska K., Kunderlikova K., Shelonzek H., Rusinowski S., Bqba W.* Frequently asked questions about chlorophyll fluorescence, the sequel // *Photosynthesis research*. — 2016. — Vol. 132, No. 1. — P. 13–66. — DOI: 10.1007/s1120-016-0318-y

- Kalaji H. M., Schansker G., Ladle R. J., Goltsev V., Bosa K., Allakhverdiev S. I., Brestic M., Bussotti F., Calatayud A., Dąbrowski P., Elsheery N. I.* Frequently asked questions about in vivo chlorophyll fluorescence: practical issues // *Photosynthesis research*. — 2014. — Vol. 122. — P. 121–158. — DOI: 10.1007/s11120-014-0024-6
- Kannt A., Young S., Bendall D. S.* The role of acidic residues of plastocyanin in its interaction with cytochrome f // *Biochim. Biophys. Acta*. — 1996. — Vol. 1277. — P. 115–126. — DOI: 10.1016/S0005-2728(96)00090-4
- Keizer J.* On the solutions and the steady states of a master equation // *J. Stat Phys.* — 1972. — Vol. 6. — P. 67–72. — <https://doi.org/10.1007/BF01023679>
- Kirchhoff H., Haase W., Wegner S., Danielsson R., Ackermann R., Albertsson P.-A.* Low-light-induced formation of semicrystalline photosystem II arrays in higher plant chloroplasts // *Biochemistry*. — 2007. — Vol. 46 (39). — P. 11169–11176. — DOI: 10.1021/bi700748y
- Klughammer C., Schreiber U.* An improved method, using saturating light pulses, for the determination of photosystem I quantum yield via P700⁺-absorbance changes at 830 nm // *Planta*. — 1994. — Vol. 192, No. 2. — P. 261–268. — DOI: 10.1007/BF01089043
- Klughammer C., Schreiber U.* Complementary PS II quantum yields calculated from simple fluorescence parameters measured by PAM fluorometry and the Saturation Pulse method // *PAM Application Notes*. — 2008a. — Vol. 1. — P. 27–35.
- Klughammer C., Schreiber U.* Saturation Pulse method for assessment of energy conversion in PS I // *PAM Application Notes*. — 2008b. — Vol. 1. — P. 11–14.
- Lazár D.* Chlorophyll a fluorescence rise induced by high light illumination of dark-adapted plant tissue studied by means of a model of photosystem II and considering photosystem II heterogeneity // *Journal of Theoretical Biology*. — 2003. — Vol. 220, No. 4. — P. 469–503.
- Lazár D.* Modelling of light-induced chlorophyll a fluorescence rise (OJIP transient) and changes in 820 nm-transmittance signal of photosynthesis // *Photosynthetica*. — 2009. — Vol. 47, No. 4. — P. 483–498. — DOI: 10.1007/s11099-009-0074-8
- Lopez C. F., Garbett S. P.* Pysb: A modeling framework to explore biochemical signaling processes and cell-decisions // *Biophysical Journal*. — 2014. — Vol. 106, No. 2. — P. 643a. — DOI: 10.1016/j.bpj.2013.11.3559
- Lopez C. F., Muhlich J. L., Bachman J. A., Sorger P. K.* Programming biological models in Python using PySB // *Molecular systems biology*. — 2013. — Vol. 9, No. 1. — P. 646. — DOI: 10.1038/msb.2013.1
- Malkin R., Knaff D. B., Bearden A. J.* The oxidation–reduction potential of membrane-bound chloroplast plastocyanin and cytochrome f // *Biochimica et Biophysica Acta (BBA) – Bioenergetics*. — 1973. — Vol. 305, No. 3. — P. 675–678. — DOI: 10.1016/0005-2728(73)90091-1
- Meurer A., Smith C. P., Paprocki M., Čertík O., Kirpichev S. B., Rocklin M., Kumar A., Ivanov S., Moore J. K., Singh S., Rathnayake T., Vig S., Granger B. E., Muller R. P., Bonazzi F., Gupta H., Vats S., Johansson F., Pedregosa F., Curry M. J., Terrel A. R., Roučka Š., Saboo A., Fernando I., Kulal S., Cimrman R., Scopatz A.* SymPy: symbolic computing in Python // *PeerJ Computer Science*. — 2017. — Vol. 3. — P. e103. — DOI: 10.7717/peerj-cs.103
- Meyer T. E., Zhao Z. G., Cusanovich M. A., Tollin G.* Transient kinetics of electron transfer from a variety of c-type cytochromes to plastocyanin // *Biochemistry*. — 1993. — Vol. 32 (17). — P. 4552–4559. — DOI: 10.1021/bi00068a010
- Millett F., Durham B.* Kinetics of electron transfer within cytochrome bc1 and between cytochrome bc1 and cytochrome c // *Photosynthesis research*. — 2004. — Vol. 82. — P. 1–16. — DOI: 10.1023/B:PRES.0000040434.77061.ca
- Modi S., He S., Gray J. C., Bendall D. S.* The role of surface-exposed Tyr-83 of plastocyanin in electron transfer from cytochrome c // *Biochimica et Biophysica Acta (BBA) – Bioenergetics*. — 1992. — Vol. 1101, No. 1. — P. 64–68. — DOI: 10.1016/0167-4838(92)90467-R

- Moser C. C., Dutton P. L. Engineering protein structure for electron transfer function in photosynthetic reaction centers // *Biochimica et Biophysica Acta (BBA) – Bioenergetics*. — 1992. — Vol. 1101, No. 2. — P. 171–176. — DOI: 10.1016/0005-2728(92)90205-G
- Moser C. C., Farid T. A., Chobot S. E., Dutton P. L. Electron tunneling chains of mitochondria // *Biochimica et Biophysica Acta (BBA) – Bioenergetics*. — 2006. — Vol. 1757, No. 9–10. — P. 1096–1109. — DOI: 10.1016/j.bbabo.2006.04.015
- mpmath: a Python library for arbitrary-precision floating-point arithmetic (version 1.3.0). — 2023. — [Electronic resource]. — <http://mpmath.org/> (accessed: 21.05.2024).
- Munekage Y., Hojo M., Meurer J., Endo T., Tasaka M., Shikanai T. PGR5 is involved in cyclic electron flow around photosystem I and is essential for photoprotection in *Arabidopsis* // *Cell*. — 2002. — Vol. 110. — P. 361–371. — DOI: 10.1016/S0092-8674(02)00867-X
- Rutherford A. W., Osyczka A., Rappaport F. Back-reactions, short-circuits, leaks and other energy wasteful reactions in biological electron transfer: redox tuning to survive life in O₂ // *FEBS letters*. — 2012. — Vol. 586, No. 5. — P. 603–616. — DOI: 10.1016/j.febslet.2011.12.039
- Sarewicz M., Bujnowicz L., Bhaduri S., Singh S. K., Cramer W. A., Osyczka A. Metastable radical state, nonreactive with oxygen, is inherent to catalysis by respiratory and photosynthetic cytochromes bc₁/b₆f // *Proceedings of the National Academy of Sciences*. — 2017. — Vol. 114, No. 6. — P. 1323–1328. — DOI: 10.1073/pnas.1618840114
- Sarewicz M., Pintscher S., Pietras R., Borek A., Bujnowicz L., Hanke G., Cramer W. A., Finazzi G., Osyczka A. Catalytic reactions and energy conservation in the cytochrome bc₁ and b₆f complexes of energy-transducing membranes // *Chemical Reviews*. — 2021. — Vol. 121, No. 4. — P. 2020–2108. — DOI: 10.1021/acs.chemrev.0c00712
- Sarewicz M., Szwalec M., Pintscher S., Indyka P., Rawski M., Pietras R., Mielecki B., Koziej L., Jaciuk M., Glatt S., Osyczka A. High-resolution cryo-EM structures of plant cytochrome b₆f at work // *Science Advances*. — 2023. — Vol. 9, No. 2. — P. eadd9688. — DOI: 10.1126/sciadv.add9688
- Schnakenberg J. Network theory of microscopic and macroscopic behavior of master equation systems // *Rev. Mod. Phys.* — 1976. — Vol. 48, No. 4. — P. 571–585. — DOI: 10.1103/revmodphys.48.571
- Shapiguzov A., Chai X., Fucile G., Longoni P., Zhang L., Rochaix J. D. Activation of the Stt7/STN7 kinase through dynamic interactions with the cytochrome b₆f complex // *Plant Physiol.* — 2016. — Vol. 171. — P. 82–92. — DOI: 10.1104/pp.15.01893
- Singh S. K., Hasan S. S., Zakharov S. D., Naurin S., Cohn W., Ma J., Whitelegge J. P., Cramer W. A. Trans-membrane signaling in photosynthetic state transitions: redox- and structure-dependent interaction in vitro between Stt7 kinase and the cytochrome b₆f complex // *J. Biol. Chem.* — 2016. — Vol. 291. — P. 21740–21750. — DOI: 10.1074/jbc.M116.732545
- Soriano G. M., Guo L. W., De Vitry C., Kallas T., Cramer W. A. Electron transfer from the Rieske iron-sulfur protein (ISP) to cytochrome f in vitro: is a guided trajectory of the ISP necessary for competent docking? // *Journal of Biological Chemistry*. — 2002. — Vol. 277 (44). — P. 41865–41871. — DOI: 10.1074/jbc.M205772200
- Stiehl H. H., Witt H. T. Quantitative treatment of the function of plastoquinone in photosynthesis // *Zeitschrift für Naturforschung B*. — 1969. — Vol. 24, No. 12. — P. 1588–1598. — DOI: 10.1515/znB-1969-1219
- Stroebel D., Choquet Y., Popot J.-L., Picot D. An atypical haem in the cytochrome b₆f complex // *Nature*. — 2003. — Vol. 426. — P. 413–418. — DOI: 10.1038/nature02155
- Szwalec M., Bujnowicz L., Sarewicz M., Osyczka A. Unexpected heme redox potential values implicate an uphill step in cytochrome b₆f // *The Journal of Physical Chemistry B*. — 2022. — Vol. 126, No. 47. — P. 9771–9780. — DOI: 10.1021/acs.jpcc.2c05729

- Tikhonov A. N.* The cytochrome b6f complex at the crossroad of photosynthetic electron transport pathways // *Plant Physiology and Biochemistry*. — 2014. — Vol. 81. — P. 163–183. — DOI: 10.1016/j.plaphy.2013.12.011
- Tikhonov A. N.* The cytochrome b6f complex: plastoquinol oxidation and regulation of electron transport in chloroplasts // *Photosynthesis Research*. — 2024. — Vol. 159, No. 2. — P. 203–227.
- Virtanen P., Gommers R., Oliphant T. E., Haberland M., Reddy T., Cournapeau D., Burovski E., Peterson P., Weckesser W., Bright J., van der Walt S. J., Brett M., Wilson J., Jarrod Millman K., Mayorov N., Nelson A. R. J., Jones E., Kern R., Larson E., Carey C. J., Polat İ., Feng Yu, Moore E. W., VanderPlas J., Laxalde D., Perktold J., Cimrman R., Henriksen I., Quintero E. A., Harris C. R., Archibald A. M., Ribeiro A. H., Pedregosa F., van Mulbregt P.* SciPy 1.0 Contributors. SciPy 1.0: fundamental algorithms for scientific computing in Python // *Nature methods*. — 2020. — Vol. 17, No. 3. — P. 261–272. — DOI: 10.1038/s41592-019-0686-2

UDC: 519.6+336.7

Assessing the impact of deposit benchmark interest rate on banking loan dynamics

M. F. Ansori^{1,a}, H. Al Jasir², A. H. Sihombing², S. M. Putra²,
D. A. Nurfaizah², E. Nurulita²

¹Department of Mathematics, Faculty of Science and Mathematics, Universitas Diponegoro,
Jl. Prof. Jacub Rais, 50275, Semarang, Indonesia

²Mathematics Undergraduate Study Program, Universitas Diponegoro,
Jl. Prof. Jacub Rais, 50275, Semarang, Indonesia

E-mail: ^a moCHFandiansori@lecturer.undip.ac.id (corresponding author)

Received 18.01.2024, after completion — 07.06.2024.

Accepted for publication 11.06.2024.

Deposit benchmark interest rates are a policy implemented by banking regulators to calculate the interest rates offered to depositors, maintaining equitable and competitive rates within the financial industry. It functions as a benchmark for determining the pricing of different banking products, expenses, and financial choices. The benchmark rate will have a direct impact on the amount of money deposited, which in turn will determine the amount of money available for lending. We are motivated to analyze the influence of deposit benchmark interest rates on the dynamics of banking loans. This study examines the issue using a difference equation of banking loans. In this process, the decision on the loan amount in the next period is influenced by both the present loan volume and the information on its marginal profit. An analysis is made of the loan equilibrium point and its stability. We also analyze the bifurcations that arise in the model. To ensure a stable banking loan, it is necessary to set the benchmark rate higher than the flip value and lower than the transcritical bifurcation values. The confirmation of this result is supported by the bifurcation diagram and its associated Lyapunov exponent. Insufficient deposit benchmark interest rates might lead to chaotic dynamics in banking lending. Additionally, a bifurcation diagram with two parameters is also shown. We do numerical sensitivity analysis by examining contour plots of the stability requirements, which vary with the deposit benchmark interest rate and other parameters. In addition, we examine a nonstandard difference approach for the previous model, assess its stability, and make a comparison with the standard model. The outcome of our study can provide valuable insights to the banking regulator in making informed decisions regarding deposit benchmark interest rates, taking into account several other banking factors.

Keywords: chaos, deposit benchmark rate, sensitivity analysis, two-parameter bifurcation

Citation: *Computer Research and Modeling*, 2024, vol. 16, no. 4, pp. 1023–1032.

This research is supported by the Faculty of Science and Mathematics, Universitas Diponegoro through Sumber Dana Selain APBN FSM UNDIP with grant number 27.III.B/UN7.F8/PP/II/2024.

Introduction

Deposit benchmark interest rates serve as a reference point for pricing various financial products, determine the cost of funds for banks, and impact monetary policy decisions. These rates, also referred to as base rates or reference rates, represent the minimum return offered by financial institutions on deposit accounts and serve as a key indicator of the current interest rate environment. The establishment of deposit benchmark interest rates provides financial market transparency and stability. These rates serve as a benchmark for pricing a vast array of financial products, including loans, mortgages, and bonds, influencing the cost of financing for individuals and businesses. These rates are used by financial institutions to compute the interest paid to depositors, ensuring fair and competitive rates across the industry. Further empirical evidence regarding factors that may influence deposit interest rate arrangement is more notable because it is commonly assumed that alterations in reference rates are spread relatively quickly to retail interest rates and then into the real economy [Anderson, Ashton, Hudson, 2014].

The study of the role of deposit interest rates on several aspects of the banking industry has been done by various approaches. The impact of market structure changes and bank-specific factors on the deposit interest rates that a bank offers in a particular local market are studied using an empirical model [Rosen, 2007]. Three different models of deposit rate determination are estimated by employing deposit interest rate quantification that is built from accounting data at the bank level for an extensive cross-sectional sample of banks for each of three different years [Hannan, Prager, 2006]. A determination of whether the Japanese bank deposit markets exhibit geographic segmentation is estimated by extending to which changes in market interest rates are reflected in deposit interest rates [Uchino, 2014]. Historical bank-level data is used to investigate the impact of deposit rate ceilings on the expansion of loans in commercial banks [Koch, 2015]. A logit model is used to link aloft deposit interest rates to bank bankruptcy, where aloft a deposit interest rate is a dependable indicator of risk-taking [Kraft, Galac, 2007].

The benchmark rate will affect the deposit inflows directly, and this cash will affect how much money can be turned into a loan. This motivates us to assess the impact of deposit benchmark interest rates on lending dynamics. Several ways to address the industrial banking problem are possible by using mathematical models. For example, a constrained optimization portfolio of the bank balance sheet to analyze the impact of a macroprudential policy on the bank's decision-making [Gunadi, Harun, 2011; Satria, Harun, Taruna, 2016], a dynamical system of bank balance sheet to study the dynamics of banking variables such as deposits, loans, equity, and reserve requirements by employing banking data [Sumarti et al., 2018; Ansori, Sidarto, Sumarti, 2019b; Ansori, Sidarto, Sumarti, 2019a; Ansori et al., 2021c], a network approach to study a macroprudential instrument and its impact on the banking system stability [Ansori et al., 2021a], and a single difference equation or a system of two difference equations of banking loan variables to survey the banking policies such as capital adequacy ratio, reserve requirements, and macroprudential policy [Fanti, 2014; Ansori et al., 2021a; Brianzoni, Campisi, 2021; Brianzoni, Campisi, Colasante, 2022; Ansori et al., 2021b; Ansori, Theotista, Winson, 2023; Ansori, Ashar, 2023; Ansori, Theotista, Febe, 2023; Ashar, Ansori, Fata, 2023]. For this purpose, we follow the latter model to investigate the role of deposit benchmark interest rates.

Model formulation

Suppose a bank balance sheet identity is given below:

$$L + R = D + E, \tag{1}$$

where L is loan, R is reserve requirement, D is deposit, and E is equity.

The reserve requirement is a monetary policy implemented by the central bank to mandate that each bank holds a specific proportion of its deposits at the central bank. This policy is formulated as an integral component of both monetary policy and macro-prudential policy. Thus, we have

$$R = \rho D, \quad 0 < \rho < 1. \quad (2)$$

Equity is required to adhere to the capital adequacy ratio regulation, which mandates that its ratio with risk-weighted assets must exceed a specific percentage. Given that this article only considers two asset variables, namely, loan and reserve requirement, it follows that the risk-weighted asset is solely the loan. In order to further simplify the model, we make the assumption that the equity is equivalent to

$$E = \kappa L, \quad 0 < \kappa < 1. \quad (3)$$

In this model, the deposit is assumed to be calculated after all variables are determined. Thus,

$$D = \frac{1 - \kappa}{1 - \rho} L. \quad (4)$$

The loan follows a gradient adjustment procedure [Bischi et al., 2010], where the following period's loan amount is determined based on the present loan and its marginal profit. It forms a difference equation as follows [Fanti, 2014]:

$$L_{t+1} = L_t + \alpha_L L_t \frac{\partial \pi_t}{\partial L_t}, \quad (5)$$

where α_L is an adjustment rate, and π_t is the bank's profit which is calculated below:

$$\pi_t = r_{L,t} L_t - r_{D,t} D_t - r_E E_t - C_t, \quad (6)$$

where $r_{L,t} = a_L - b_L L_t$ is the inverse linear loan interest rate, $r_{D,t} = a_D + b_D D_t$ is the inverse linear deposit interest rate [Klein, 1971; Monti, 1972], r_E is constant equity cost, and $C_t = c_D D_t + c_L L_t$ is the linear operational cost. All parameters are positive.

Next, we assume that the parameter of the deposit interest rate is defined as $a_D = a_{D0} - a_{D1}$, where a_{D0} is the deposit benchmark interest rate set by the central bank. Usually, the banking industry establishes its deposit interest rate at a level below the benchmark set by the central bank. The parameter a_{D0} is the focal point of our investigation since we aim to examine its influence on the dynamics of banking loans.

By those assumptions, the bank's profit becomes

$$\pi_t = \left(a_L - \left[r_E \kappa + c_L + (a_{D0} - a_{D1} + c_D) \left(\frac{1 - \kappa}{1 - \rho} \right) \right] \right) L_t - \left[b_L + b_D \left(\frac{1 - \kappa}{1 - \rho} \right)^2 \right] L_t^2. \quad (7)$$

Thus, the banking loan model in (5) becomes

$$L_{t+1} = L_t + \alpha_L L_t \left(a_L - \left[r_E \kappa + c_L + (a_{D0} - a_{D1} + c_D) \left(\frac{1 - \kappa}{1 - \rho} \right) \right] - 2 \left[b_L + b_D \left(\frac{1 - \kappa}{1 - \rho} \right)^2 \right] L_t \right). \quad (8)$$

Local stability and bifurcations analysis

Model (8) has two equilibria: a zero equilibrium $L_{(0)}^* = 0$ and a positive equilibrium

$$L_{(1)}^* = \frac{a_L - [r_E \kappa + c_L + (a_{D0} - a_{D1} + c_D) \left(\frac{1-\kappa}{1-\rho} \right)]}{2 \left[b_L + b_D \left(\frac{1-\kappa}{1-\rho} \right)^2 \right]}.$$

The positive equilibrium will have a positive value if it fulfills the following criterion:

$$a_L > r_E \kappa + c_L + (a_{D0} - a_{D1} + c_D) \left(\frac{1-\kappa}{1-\rho} \right). \quad (9)$$

The subsequent theorem asserts the local stability of the equilibria.

Theorem 1. *The zero equilibrium is unstable. Furthermore, the positive equilibrium is considered to be locally asymptotically stable if*

$$a_{D0} > \left(a_L - \left(\frac{2}{\alpha_L} + r_E \kappa + c_L \right) \right) \left(\frac{1-\rho}{1-\kappa} \right) + a_{D1} - c_D. \quad (10)$$

Proof. To begin with, let us consider the loan model expressed in equation (8) and rephrase it as $L_{t+1} = f(L_t)$. The function f is differentiated once to obtain $f'(L_t) = 1 + \alpha_L \left(a_L - r_E \kappa - c_L + (a_{D1} - a_{D0} - c_D) \left(\frac{1-\kappa}{1-\rho} \right) \right) - 4\alpha_L \left(b_L + b_D \left(\frac{1-\kappa}{1-\rho} \right)^2 \right) L_t$. Based on [Alligood, Sauer, Yorke, 1996], equilibrium L^* is locally asymptotically stable if $|f'(L^*)| < 1$. In the case of $L_{(0)}^*$, we have $f'(L_{(0)}^*) = 1 + \alpha_L \left(a_L - [r_E \kappa + c_L + (a_{D0} - a_{D1} + c_D) \left(\frac{1-\kappa}{1-\rho} \right)] \right) > 1$, because we have the positivity condition in (9). Thus, the zero equilibrium is not stable. In the case of positive equilibrium, it is clear that $f'(L_{(1)}^*) = 1 - \alpha_L \left(a_L - [r_E \kappa + c_L + (a_{D0} - a_{D1} + c_D) \left(\frac{1-\kappa}{1-\rho} \right)] \right) < 1$. However, $f'(L_{(1)}^*) > -1$ if $a_{D0} > \left(a_L - \left(\frac{2}{\alpha_L} + r_E \kappa + c_L \right) \right) \left(\frac{1-\rho}{1-\kappa} \right) + a_{D1} - c_D$. $\square$

Bifurcations occur in the loan model (8) when the absolute value of the derivative of f with respect to L at L^* is equal to 1. The transcritical bifurcation occurs when $f'(L^*)$ is equal to 1, while the flip (doubling-period) bifurcation occurs when $f'(L^*)$ is equal to -1 . The subsequent theorem establishes the significance of those bifurcations.

Theorem 2. *The positive equilibrium's stability is compromised by transcritical and flip bifurcations when the deposit benchmark interest rate is equal to $a_{D0} = a_{D0}^T$ where $a_{D0}^T = \left(a_L - (r_E \kappa + c_L) \right) \left(\frac{1-\rho}{1-\kappa} \right) + a_{D1} - c_D$ and $a_{D0} = a_{D0}^F$ where $a_{D0}^F = \left(a_L - \left(\frac{2}{\alpha_L} + r_E \kappa + c_L \right) \right) \left(\frac{1-\rho}{1-\kappa} \right) + a_{D1} - c_D$, respectively. In addition, the positive equilibrium is stable and exists when $a_{D0}^F < a_{D0} < a_{D0}^T$.*

Proof. The values of the bifurcations can be quickly found by solving the equation $|f'(L^*)| = 1$. The inequality $a_{D0}^F < a_{D0} < a_{D0}^T$ may be deduced from Theorem 1, which states that $a_{D0} > a_{D0}^F$, and the fact that $a_{D0}^F < a_{D0}^T$. $\square$

The deposit benchmark interest rate ranges from 0 to 1. Therefore, for economic significance, both the flip and transcritical bifurcation values must likewise fall within the range of 0 and 1. If $0 < a_{D0}^F < 1$, then $c_D - \left(a_L - (r_E \kappa + c_L) \right) \left(\frac{1-\rho}{1-\kappa} \right) < a_{D1} < 1 + c_D - \left(a_L - (r_E \kappa + c_L) \right) \left(\frac{1-\rho}{1-\kappa} \right)$. Meanwhile, the condition $0 < a_{D0}^T < 1$ implies $\frac{2}{a_L - [(c_D - a_{D1}) \left(\frac{1-\kappa}{1-\rho} \right) + r_E \kappa + c_L]} < \alpha_L < \frac{2}{a_L - [(1 + c_D - a_{D1}) \left(\frac{1-\kappa}{1-\rho} \right) + r_E \kappa + c_L]}$.

An additional interesting analysis can be conducted by examining the partial derivative of the transcritical and flip bifurcations with respect to the model's parameters. This allows us to assess the extent to which the parameters influence the values of the bifurcations.

For the transcritical bifurcation, we have,

$$\begin{aligned}\frac{\partial a_{D0}^T}{\partial a_{D1}} &= 1 > 0, & \frac{\partial a_{D0}^T}{\partial a_L} &= \frac{1-\rho}{1-\kappa} > 0, & \frac{\partial a_{D0}^T}{\partial r_E} &= -\frac{\kappa(1-\rho)}{1-\kappa} < 0, \\ \frac{\partial a_{D0}^T}{\partial \rho} &= -\frac{a_L - (r_E\kappa + c_L)}{1-\kappa} < 0, & \frac{\partial a_{D0}^T}{\partial \kappa} &= (a_L - (r_E\kappa + c_L))\frac{(1-\rho)}{(1-\kappa)^2} > 0, \\ \frac{\partial a_{D0}^T}{\partial c_D} &= -1 < 0, & \frac{\partial a_{D0}^T}{\partial c_L} &= -\frac{1-\rho}{1-\kappa} < 0.\end{aligned}$$

In the case of the flip bifurcation, we have,

$$\begin{aligned}\frac{\partial a_{D0}^F}{\partial a_{D1}} &= 1 > 0, & \frac{\partial a_{D0}^F}{\partial a_L} &= \frac{1-\rho}{1-\kappa} > 0, & \frac{\partial a_{D0}^F}{\partial r_E} &= -\frac{\kappa(1-\rho)}{1-\kappa} < 0, \\ \frac{\partial a_{D0}^F}{\partial \rho} &= -\frac{a_L - \left(\frac{2}{\alpha_L} + r_E\kappa + c_L\right)}{1-\kappa} < 0, & \frac{\partial a_{D0}^F}{\partial \kappa} &= \left(a_L - \left(\frac{2}{\alpha_L} + r_E\kappa + c_L\right)\right)\frac{(1-\rho)}{(1-\kappa)^2} > 0, \\ \frac{\partial a_{D0}^F}{\partial c_D} &= -1 < 0, & \frac{\partial a_{D0}^F}{\partial c_L} &= -\frac{1-\rho}{1-\kappa} < 0, \\ \frac{\partial a_{D0}^F}{\partial \alpha_L} &= \frac{2}{\alpha_L^2} \left(\frac{1-\rho}{1-\kappa}\right) > 0.\end{aligned}$$

In order to ensure the stability of the loan, the regulator or bank can adjust the other parameters accordingly. If the partial derivative of a_{D0}^F is negative, they may set the other parameters to have higher values. Conversely, if the partial derivative of a_{D0}^F is positive, they may set the other parameters to have lower values.

Numerical simulations

To validate the analytical findings, we conduct a series of simulations including the bifurcation diagram, the Lyapunov exponent associated with the bifurcation diagram, a two-parameter bifurcation diagram, and sensitivity analysis. All simulations utilize the parameter values specified in Table 1. These values are selected for simulation purposes only, yet they still fulfill all the requirements stated in the previous section.

Table 1. Parameters' value

Parameter	Description	Value
a_{D0}	Deposit benchmark interest rate	Vary
a_{D1}	Bank's deposit interest rate adjustment	0.01
b_D	Bank's deposit interest rate adjustment to the deposit volumes	0.05
a_L	Loan interest rate adjustment	0.2
b_L	Loan interest rate adjustment to the loan volumes	0.05
r_E	Rate of return of equity	0.05
ρ	Reserve requirement	0.12
κ	Capital adequacy ratio	0.08
c_D	Deposit's operating cost	0.05
c_L	Loan's operating cost	0.05
α_L	Speed of adjustment rate	5

The graph in Fig. 1, *a* illustrates the bifurcation of the deposit benchmark interest rate a_{D0} . We discover that reducing the value of a_{D0} leads to an increase in the loan equilibrium. Insufficient a_{D0} will result in complex dynamics behavior of loan expansion. The presence of chaos in this intricate dynamics can be demonstrated by a positive Lyapunov exponent, as indicated by the red dots in Fig. 1, *b*. To ensure the stability of the banking loan, it is necessary to fix the value of a_{D0} between the flip and transcritical bifurcation values.

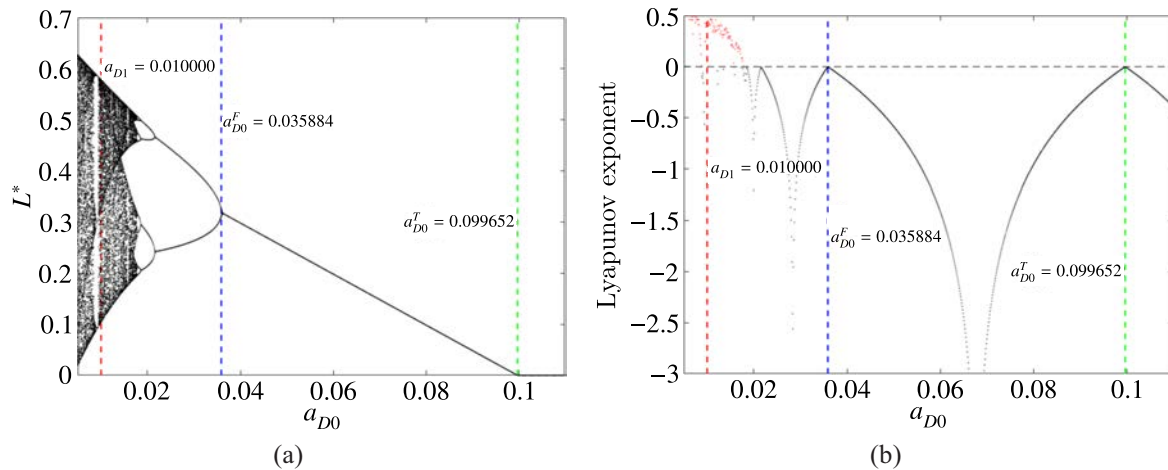


Figure 1. (a) Bifurcation diagram of a_{D0} and (b) the related Lyapunov exponent

Figure 2 displays a two-parameter bifurcation diagram of a_{D0} and a_{D1} , as well as a_{D0} and b_D , illustrating the joint impact of these parameters on the banking loan equilibrium's stability. The simulation is conducted using an algorithm suggested in [Ansori, Ashar, Fata, 2024]. The algorithm represents the parameter points that are coupled in blue, green, or red markers, depending on whether the banking loans are steady, periodic, or chaotic. The simulation allows us to view the specific location, represented by the blue region, where stable banking loans may be ensured.

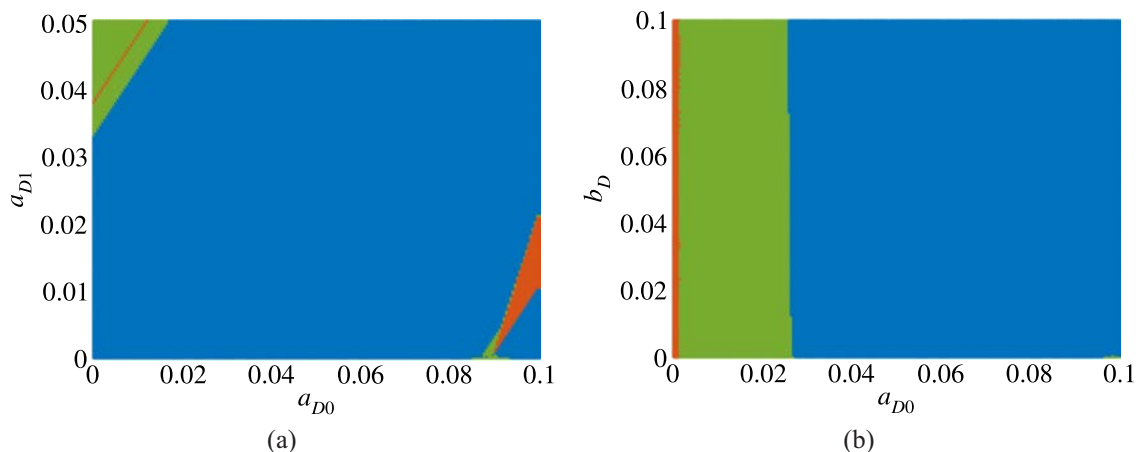


Figure 2. Two-parameter bifurcation diagram of (a) $a_{D0} - a_{D1}$ and (b) $a_{D0} - b_D$

The stability condition of the positive equilibrium $L_{(1)}^*$ in (10) is rewritten as $S := \frac{(a_L - (\frac{2}{a_L} + r_E \kappa + c_L))(\frac{1-\rho}{1-\kappa}) + a_{D1} - c_D}{a_{D0}} < 1$. Therefore, we can conclude that $L_{(1)}^*$ is locally asymptotically stable for $S < 1$. Now, we see S as a function with two variables, and our focus is on creating a contour plot of this function. In Fig. 3, we provide the contour plot of S for combinations of a_{D0} with the remaining

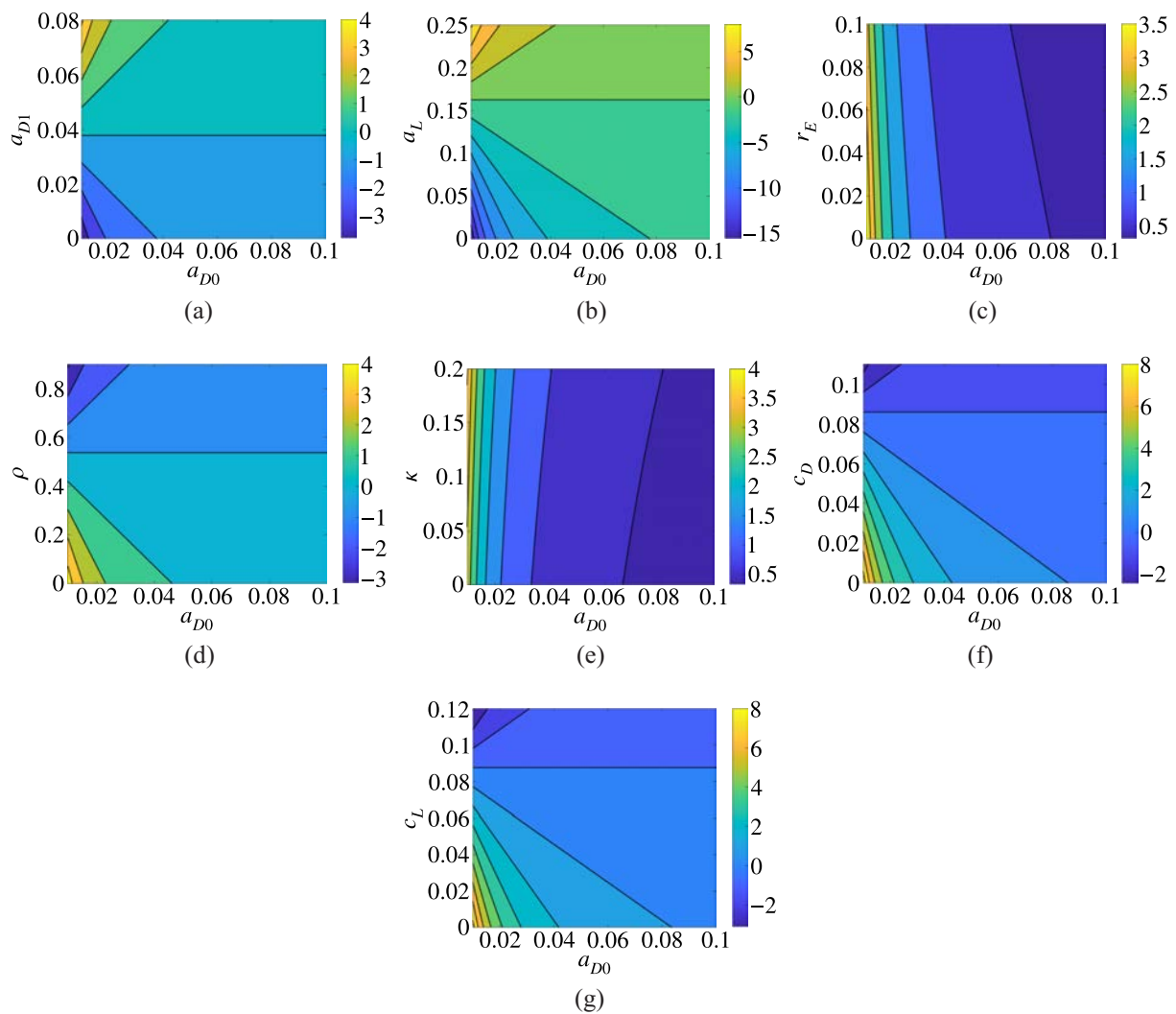


Figure 3. Contour plot of sensitivity function S as a function of two parameters: a_{D0} and (a) a_{D1} , (b) a_L , (c) r_E , (d) ρ , (e) κ , (f) c_D , and (g) c_L . The area with a heat color value of less than 1 means that the loan equilibrium is stable if the parameters' value is in there

parameters. Through analysis, we can identify the region in the contour plot where the spectrum has a value below 1, indicating the presence of stable banking loans.

Model with a nonstandard difference scheme

We modify the model (8) by using a nonstandard difference scheme [Mickens, 1994; Shabbir et al., 2019; Khan et al., 2022]. First, let us simplify the writing of the model (8) into

$$L_{t+1} = L_t + \alpha_L L_t (\Lambda - \Omega L_t), \quad (11)$$

where $\Lambda = a_L - [r_E \kappa + c_L + (a_{D0} - a_{D1} + c_D) \left(\frac{1-\kappa}{1-\rho} \right)]$ and $\Omega = 2 \left[b_L + b_D \left(\frac{1-\kappa}{1-\rho} \right)^2 \right]$. From (10) we know that $\Lambda > 0$, and since all parameters are positive, it follows that $\Omega > 0$.

The modification of the nonstandard difference scheme is by letting the term on the right-hand side of (11) that has a negative sign, i. e., $-\alpha_L \Omega L_t^2$, be changed into $-\alpha_L \Omega L_t L_{t+1}$. From this we have

$$L_{t+1} = \frac{(1 + \alpha_L \Lambda) L_t}{1 + \alpha_L \Omega L_t}. \quad (12)$$

The difference equation (12) has the same equilibrium points of the difference equation (8), that is,

$$L_{(0)}^* = 0 \quad \text{and} \quad L_{(1)}^* = \frac{\Lambda}{\Omega}.$$

Suppose the right-hand side of (12) is denoted by $g(L_t)$, then we have

$$g'(L_t) = \frac{1 + \alpha_L \Lambda}{(1 + \alpha_L \Omega L_t)^2}.$$

If we substitute $L_{(0)}^* = 0$ into $g'(L_t)$, we have $g'(0) = 1 + \alpha_L \Lambda > 1$. Thus, the equilibrium $L_{(0)}^* = 0$ is not stable. For the case of $L_{(1)}^* = \frac{\Lambda}{\Omega}$ we have $\left|g'\left(\frac{\Lambda}{\Omega}\right)\right| = \left|\frac{1}{1 + \alpha_L \Lambda}\right| < 1$. Thus, the equilibrium $L_{(1)}^* = \frac{\Lambda}{\Omega}$ is locally asymptotically stable. Thus, according to this modified model, there is no bifurcation, since $g'\left(\frac{\Lambda}{\Omega}\right)$ is never equal to -1 or 1 .

In Fig. 4, *a*, we illustrate the changes in banking loans by employing the model (8) and the nonstandard difference model (12) with varying values of α_L . It is important to remember that α_L represents a parameter that determines the speed of adjustment. The time series of the standard model is affected by the value of α_L , whereas the nonstandard difference model is not modified. However, Fig. 4, *b* demonstrates that an increase in the value of a_{D0} in the nonstandard model leads to a decrease in its equilibrium of banking loans.

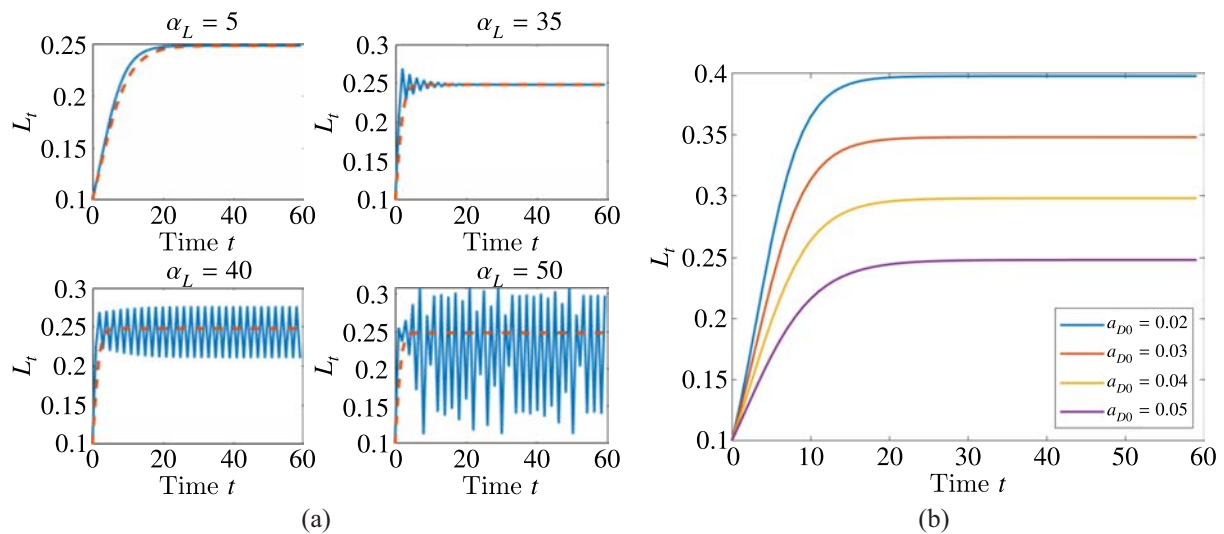


Figure 4. (a) Time series comparison between the standard difference model (blue line) and the nonstandard difference model (red dashed line) for different values of α_L . (b) The impact of different values of a_{D0} on the nonstandard difference model

Conclusions

According to the analytical and numerical findings, we discover that the deposit benchmark interest rate has a significant impact on the dynamics of banking loans. Initially, the regulator should contemplate establishing the benchmark rate at a level that is neither excessively elevated (as indicated by the transcritical bifurcation value) nor excessively low (as indicated by the flip bifurcation value). This outcome is consistent with the findings reported in [Ansori, Ashar, Fata, 2024]. Furthermore, an elevated benchmark rate will result in a decrease in the growth of banking loans. The regulator can utilize sensitivity analysis to adjust the regulation of the benchmark rate in response to fluctuations in

other factors within the banking industry. The change aims to ensure the stability of banking loans. The scientific potential of our proposed model can be enhanced by incorporating nonlinear, stochastic, or fractional interest rates, as recommended in other academic works [Brianzoni, Campisi, Colasante, 2022; Huang, Jiang, Wang, 2020; Zhu, 2015].

References

- Alligood K., Sauer T., Yorke J.* Chaos: an introduction to dynamical systems. — New York: Springer-Verlag, 1996.
- Anderson R.D.J., Ashton J.K., Hudson R.S.* The influence of product age on pricing decisions: An examination of bank deposit interest rate setting // *Journal of International Financial Markets, Institutions and Money*. — 2014. — Vol. 31. — P. 216–230. — <https://doi.org/10.1016/j.intfin.2014.03.010>
- Ansori M.F., Ashar N.Y.* Analysis of loan benchmark interest rate in banking loan dynamics: bifurcation and sensitivity analysis // *Journal of Mathematics and Modeling in Finance*. — 2023. — Vol. 3, No. 1. — P. 191–202. — <https://doi.org/10.22054/jmmf.2023.74976.1098>
- Ansori M.F., Ashar N.Y., Fata H.K.* Logistic map-based banking loan dynamics with central bank policies // *Journal of Applied Nonlinear Dynamics*. — 2024 (in press).
- Ansori M.F., Sidarto K.A., Sumarti N.* Logistic models of deposit and loan between two banks with saving and debt transfer factors // *AIP Conference Proceedings*. — 2019a. — Vol. 2192. — DOI: 10.1063/1.5139148
- Ansori M.F., Sidarto K.A., Sumarti N.* Model of deposit and loan of a bank using spiral optimization algorithm // *Journal of the Indonesian Mathematical Society*. — 2019b. — Vol. 25, No. 3. — P. 292–301.
- Ansori M.F., Sumarti N., Sidarto K.A., Gunadi I.* An algorithm for simulating the banking network system and its application for analyzing macroprudential policy // *Computer Research and Modeling*. — 2021a. — Vol. 13, No. 6. — P. 1275–1289. — DOI: 10.20537/2076-7633-2021-13-6-1275-1289
- Ansori M.F., Sumarti N., Sidarto K.A., Gunadi I.* Analyzing a macroprudential instrument during the COVID-19 pandemic using border collision bifurcation // *Revista Electrónica de Comunicaciones y Trabajos de ASEPUMA Rect@*. — 2021b. — Vol. 22, No. 2. — P. 113–125. — DOI: 10.24309/recta.2021.22.2.04
- Ansori M.F., Sumarti N., Sidarto K.A., Gunadi I.* Dynamics of bank's balance sheet: a system of deterministic and stochastic differential equations approach // *International Journal of Mathematics and Computer Science*. — 2021c. — Vol. 16, No. 3. — P. 871–884.
- Ansori M.F., Theotista G., Febe M.* The influence of the amount of premium and membership of IDIC on banking loan procyclicality: a mathematical model // *Advances in Dynamical Systems and Applications*. — 2023. — Vol. 18, No. 2. — P. 111–123. — <http://www.ripublication.com>
- Ansori M.F., Theotista G., Winson.* Difference equation-based banking loan dynamics with reserve requirement policy // *International Journal of Difference Equations*. — 2023. — Vol. 18, No. 1. — P. 35–48.
- Ashar N.Y., Ansori M.F., Fata H.K.* The effects of capital policy on banking loan dynamics: a difference equation approach // *International Journal of Difference Equations*. — 2023. — Vol. 18, No. 1. — P. 267–279.
- Bischi G.-I., Chiarella C., Kopel M., Szidarovszky F.* Nonlinear oligopolies: stability and bifurcations. — Berlin: Springer-Verlag, 2010.
- Brianzoni S., Campisi G.* Dynamical analysis of a banking duopoly model with capital regulation and asymmetric costs // *Discrete and Continuous Dynamical Systems – Series B*. — 2021. — Vol. 26, No. 11. — P. 5807–5825. — DOI: 10.3934/DCDSB.2021116

- Brianzoni S., Campisi G., Colasante A.* Nonlinear banking duopoly model with capital regulation: The case of Italy // *Chaos, Solitons & Fractals*. — 2022. — Vol. 160. — P. 112209. — DOI: 10.1016/J.CHAOS.2022.112209
- Fanti L.* The dynamics of a banking duopoly with capital regulations // *Economic Modelling*. — 2014. — Vol. 37. — P. 340–349. — DOI: 10.1016/J.ECONMOD.2013.11.010
- Gunadi I., Harun C. A.* Revitalising reserve requirement in banking model: An industrial organisation approach // *SEACEN Occasional Papers*. — 2011. — No. 51.
- Hannan T. H., Prager R. A.* Multimarket bank pricing: An empirical investigation of deposit interest rates // *Journal of Economics and Business*. — 2006. — Vol. 58, No. 3. — P. 256–272. — <https://doi.org/10.1016/j.jeconbus.2005.07.004>
- Huang Z., Jiang T., Wang Z.* On a multiple credit rating migration model with stochastic interest rate // *Mathematical Methods in the Applied Sciences*. — 2020. — Vol. 43. — P. 7106–7134. — DOI: 10.1002/mma.6435
- Khan M. S., Samreen M., Ozair M., Hussain T., Elsayed E. M., Gómez-Aguilar J. F.* On the qualitative study of a two-trophic plant-herbivore model // *Journal of Mathematical Biology*. — 2022. — Vol. 85, No. 34. — P. 1–35.
- Klein M. A.* A theory of the banking firm // *Journal of Money, Credit, and Banking*. — 1971. — Vol. 3. — P. 205–218.
- Koch C.* Deposit interest rate ceilings as credit supply shifters: bank level evidence on the effects of regulation q // *Journal of Banking & Finance*. — 2015. — Vol. 61. — P. 316–326.
- Kraft E., Galac T.* Deposit interest rates, asset risk and bank failure in Croatia // *Journal of Financial Stability*. — 2007. — Vol. 2, No. 4. — P. 312–336.
- Mickens R. E.* Nonstandard finite difference models of differential equations. — Singapore: World Scientific, 1994.
- Monti M.* Deposit, credit and interest rates determination under alternative objective functions // *Mathematical methods in investment and finance* / G. P. Szego, K. Shell (eds.). — Amsterdam, 1972.
- Rosen R. J.* Banking market conditions and deposit interest rates // *Journal of Banking & Finance*. — 2007. — Vol. 31, No. 12. — P. 3862–3884.
- Satria D., Harun C., Taruna A.* The macro-prudential aspects of loan-to deposit-ratio-linked reserve requirement // *Applied Economics*. — 2016. — Vol. 48, No. 1. — P. 24–34.
- Shabbir M. S., Din Q., Safeer M., Khan M. A., Ahmad K.* A dynamically consistent nonstandard finite difference scheme for a predator–prey model // *Advances in Difference Equations*. — 2019. — Vol. 2019, No. 381. — P. 1–17.
- Sumarti N., Fadhlurrahman A., Widyani H. R., Gunadi I.* The dynamical system of the deposit and loan volumes of a commercial bank containing interbank lending and saving factors // *Southeast Asian Bulletin of Mathematics*. — 2018. — Vol. 42. — P. 757–772.
- Uchino T.* Bank deposit interest rate pass-through and geographical segmentation in Japanese banking markets // *Japan and the World Economy*. — 2014. — Vol. 30. — P. 37–51.
- Zhu Y.* Uncertain fractional differential equations and an interest rate model // *Mathematical Methods in the Applied Sciences*. — 2015. — Vol. 38. — P. 3359–3368.