



ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

17-96-94

На правах рукописи
УДК 538.9 + 541.183

X-724

ХОЛМУРОДОВ
Холмирзо Тагойкулович

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
НЕЛИНЕЙНЫХ ЭФФЕКТОВ
В КОНДЕНСИРОВАННЫХ СИСТЕМАХ

Специальности: 05.13.16 — применение
вычислительной техники, математического моделирования
и математических методов в научных исследованиях;
01.04.07 — физика твёрдого тела

Автореферат диссертации на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук

Дубна 1996

Работа выполнена на физическом факультете Таджикского Государственного Университета и Лаборатории Вычислительной Техники и Автоматизации Объединенного Института Ядерных Исследований

Официальные оппоненты:
доктор физико-математических наук
профессор
доктор физико-математических наук
профессор
доктор физико-математических наук

С.Ф. Тимашев

Л.А. Уварова
В.Д. Лахно

Ведущая организация - Институт высокопроизводительных вычислительных систем РАН; г.Москва

Защита диссертации состоится " " 1996 г. на заседании специализированного Совета Д 047.01.04 по защите докторских диссертаций при Лаборатории Вычислительной Техники и Автоматизации Объединенного Института Ядерных Исследований, 141980, Дубна, Моск. обл., ЛВТА, ОИЯИ.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ОИЯИ.

Автореферат разослан " " 1996 г.

Ученый секретарь специализированного Совета
кандидат физико-математических наук

Иванченко З.М.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

АКТУАЛЬНОСТЬ ТЕМЫ: Прогресс в изучении физических, химических, биологических и других систем неразрывно связан с анализом существенно нелинейных эффектов. Теоретическое описание и математическое моделирование явлений в разных областях науки зачастую приводят к исследованию нелинейных дифференциальных уравнений в частных производных. В терминах решений нелинейных уравнений описываются совершенно различные по своей природе физические, химические, биологические и т.п. системы. Исследованные в диссертации нелинейные модели условно можно разбить на две группы: модели, описывающие физико-химические неравновесные сорбционные процессы, и полевые модели в конденсированных системах.

На основе нелинейных моделей первой группы изучаются и моделируются процессы, которые протекают на границе раздела двух фаз (твердое тело—газ, твердое тело—жидкость и т.п.) и играют существенную роль в широком круге физических и химических явлений. Здесь в первую очередь можно назвать процессы адсорбции и десорбции вещества. Несмотря на различия физико-химической природы все адсорбционные процессы существенно влияют на динамику переноса вещества (газа, жидкости). При этом возможны как количественное, так и качественное изменения состава. Адсорбирующая среда способна активно повлиять на линейный перенос, сделав последний нелинейным; привести к самосогласованному формированию концентрационных профилей в системе адсорбат—адсорбент и в итоге—к резкому выбыванию из потока сорбирующего компонента. Это может иметь практическое значение во многих прикладных задачах (катализа, в процессах очистки и т.д.). При этом поверхность адсорбента естественным образом из потока "выборочно подбирает" отдельную компоненту. Многочисленные экспериментальные факты, в особенности по физической адсорбции газов и жидкостей на цеолитах, показывают, что в поры сорбента могут проникать атомы или молекулы только определенной формы и размера (с учетом полярности и поляризуемости адсорбируемой молекулы); их молекулярно-ситовое действие проявляется в различной степени.

Экспериментальные результаты по адсорбции газов на поверхности твердых тел свидетельствуют о разнообразном поведении теплот адсорбции с ростом степени заполнения поверхности. Зачастую из-

менение теплоты адсорбции связывают с взаимодействием (притяжением) между адсорбированными молекулами. Вместе с тем можно заключить, что большая часть экспериментальных результатов по определению характеристик сорбции вещества однозначно приводит к выводу, что учет взаимодействия частиц в сорбционной системе необходим. Это обстоятельство является важным в изучении адсорбционных явлений и их влияния на протекание процессов переноса веществ.

Математическое описание процессов равновесной и неравновесной сорбции вещества традиционно базируется на феноменологических моделях. Однако многие известные модели динамики сорбции вещества игнорируют взаимодействие частиц (атомов или молекул) в адсорбционной системе. Существующие модели для описания процессов переноса и сорбционного массообмена ограничиваются анализом в рамках лишь линейных изотерм или изотермы Ленгмюра, что недостаточно для учета корреляционных эффектов и механизмов взаимодействия адсорбатов в адсорбирующей среде. Качественная оценка экспериментальных данных по теплотам адсорбции и изотермам различных газов на поверхности твердых тел показывают, что вышеуказанные механизмы и определяют вид экспериментальных кривых. Изучение неравновесной динамики адсорбционных процессов, количественный анализ формирования и эволюции концентрационных зависимостей даже в одномерных средах неизбежно требует привлечения численных расчетов и проведения мощных вычислительных экспериментов. Налицо тесная связь между теорией конденсированного состояния, физической химией (в первую очередь с проблемами сорбции и катализа) и использованием эффективных алгоритмов и методов вычислительной математики. Исследованию процессов переноса вещества с учетом влияния активного элемента в одном, двух и трех измерениях посвящена первая часть диссертации.

Вторая часть диссертации посвящена моделированию нелинейных явлений в рамках полевых моделей физики конденсированного состояния. Изучение нелинейных явлений в конденсированных системах в последние годы неразрывно связано с исследованием локализованных возбуждений солитонного типа. Они встречаются в таких областях, как сверхпроводимость и магнетизм, сверхтекучесть квантовых жидкостей, в нелинейной оптике, в квазиодномерных системах с новыми механизмами проводимости заряда и спина и во многих других. Теоретическое описание реальных физических систем на основе концепций солитоноподобных возбуждений представляет собой одну из актуальнейших областей современной физики. При этом задачами первостепенной важности в исследовании нелинейных возбуждений являются вопросы

нелинейного спектрального преобразования произвольного начального импульса, генерируемого в системе. В недиссипативных системах, описываемых нелинейными дифференциальными уравнениями в частных производных, солитонные моды представляют собой наиболее устойчивые когерентные образования и поэтому исследование динамики солитонов с целью определения областей их генерации или их отсутствия вообще дает прямой ответ на вопрос о порядке или хаосе в системе.

Исследование нелинейных эффектов неразрывно связано с применением синергетического подхода, включающего в себя синтез аналитических и численных методов исследования. Если в одномерных интегрируемых системах исследование удастся провести аналитически, в частности, известным методом обратной задачи рассеяния (включающего решение задачи Коши для данной нелинейной модели, линейную задачу, теорию возмущений и т.д.), то в неинтегрируемых и неоднородных системах только применение методов вычислительной синергетики позволяет получить желаемый ответ. Среди многочисленных моделей физики конденсированных сред универсальными свойствами обладают модели неидеального бозе-газа, описываемые в квазиклассическом приближении либо в методе самосогласованного поля уравнением Шредингера с полиномиальной нелинейностью. Поэтому исследование динамики солитонов в этих моделях представляет одну из наиболее актуальных задач современной нелинейной математической физики, которой посвящена другая часть диссертации.

Целью диссертационной работы является:

1) Теоретическое исследование и математическое моделирование процессов переноса веществ в адсорбирующей среде при учете взаимодействий атомов в адсорбате. Развитие и количественный анализ единого подхода к описанию процессов переноса в открытой системе, когда активный элемент сорбирует из среды частицы. Выявление и количественная оценка основных параметров неравновесной динамики процессов сорбционного массообмена, приводящих к существенно нелинейным режимам формирования концентрационных зависимостей.

2) Аналитическое и численное исследование динамики нелинейных (солитоноподобных) возбуждений в моделях бозе-газа с полиномиальной нелинейностью.

Научная новизна работы заключается

1) В новом подходе к описанию процессов сорбционного массопереноса в одном, двух и трех измерениях. Впервые аналитически и численно исследована неравновесная динамика сорбции с использованием нелинейных изотерм адсорбции и десорбции, учитывающих корреляционные эффекты и взаимодействия частиц в адсорбционной системе.

На основе численного анализа решений системы нелинейных дифференциальных уравнений газодинамики и кинетики сорбции количественно исследована динамика формирования концентраций в открытой системе поток и адсорбат. Показано, что учет взаимодействия адатомов в открытой системе адсорбат—адсорбент приводит к возникновению в системе "химического времени", в зависимости от которого концентрация в потоке меняется скачкообразно. Проведен анализ динамики переноса в адсорбирующей среде в области совместного влияния продольной диффузии и внешнедиффузионной кинетики. На основе подхода об активированном комплексе, как переходном состоянии кинетики сорбции, исследован перенос газа частиц, сорбируемых активной поверхностью. В рамках квантово-статистического гамильтониана изинговского типа для открытой системы адсорбат—адсорбент изучено влияние активированных комплексов на процессы переноса. Полученные результаты обобщены, полагая стохастичность процессов переноса в сорбирующей системе. Проведено сравнение результатов в рамках трех приближений корреляционных эффектов в адсорбате.

2) В рамках нелинейных моделей физики конденсированного состояния, описываемых уравнением Шредингера с полиномиальной нелинейностью, количественно выявлены и проанализированы ряд пороговых явлений. Впервые установлено существование порога образования солитонов при распаде монохроматических импульсов для уравнения Кортевега-де Вриза (КдВ). Найдены пороги образования "темных" солитонов при дифракции солитона в нелинейной дефокусирующей среде. Исследована устойчивость солитонных решений нового типа $u(2)$ нелинейного уравнения Шредингера (НУШ). Изучена динамика локализованных, солитоноподобных возбуждений ("пузырей") неидеального бозе-газа в пространствах с числом измерений $D = 1, 2, 3$, и найдена область устойчивости движущихся пузырей.

Научное и практическое значение работы состоит в том, что

1) Впервые предложен и численно проанализирован единый подход к описанию процессов переноса в активных, сорбирующих системах с числом измерений $D = 1, 2, 3$. На основе предложенного подхода впервые удается в явном виде количественно учесть взаимодействия основных "фаз" системы адсорбат—адсорбент и корреляционные эффекты в системе адатом—адатом и адатом—активированный комплекс (АК). Анализ экспериментальных данных и оценка полученных численных результатов показывают, что учет эффектов взаимодействия адатомов приводит к нелинейным режимам формирования концентраций в адсорбирующей системе. Выявлены и количественно проанализированы режимы формирования существенно нелинейных concentra-

ционных волн в системе поток и адсорбат. Помимо фундаментального значения, полученные результаты могут быть использованы для анализа и подбора адсорбентов с заданными свойствами с целью их прикладного применения (в процессах очистки нефти, газовой хроматографии и т.п.). Полученные результаты могут быть применены для интерпретации экспериментальных данных по физической адсорбции в кристаллических цеолитах.

2) Полученные в диссертации результаты по динамике солитоноподобных волн могут быть использованы при анализе нелинейных структур в физике конденсированного состояния. Изученный пороговый характер образования солитонов может быть использован при описании структурных фазовых переходов в конденсированных средах, при исследовании и применении нелинейных электрических цепей, а также при разработке новых механизмов записи и передачи информации в волоконных световодах. Результаты по динамике "пузырей в конденсате" имеют важное значение для анализа сверхтекучих бозе-жидкостей и сверхпроводящих высокотемпературных соединений.

Основные результаты, выносимые на защиту.

1. Предложен единый подход к описанию процессов переноса в сорбционных системах, учитывающий взаимодействия адсорбатов и эффектов корреляций между частицами. На основе квантово-статистического гамильтониана изинговского типа для открытой системы адсорбат—адсорбент разработана модель переноса газа частиц, сорбируемых активной поверхностью. Для описания неравновесной динамики сорбции в пространствах с числом измерений $D = 1, 2, 3$ получена система уравнений в которой для точного учета корреляционных эффектов между адатомами в неравновесной адсорбционной системе существенно лишь число ближайших соседей, взаимодействующих с данным адатомом.

2. Проведен численный анализ системы нелинейных дифференциальных уравнений газодинамики и кинетики сорбции и изучена динамика формирования концентраций в открытой системе поток и адсорбат. Установлен, что учет взаимодействия адатомов в открытой системе адсорбат—адсорбент приводит к возникновению в системе "химического времени", в зависимости от которого концентрация в потоке меняется скачкообразно.

3. Изучена динамика переноса в адсорбирующей среде в области совместного влияния продольной диффузии и внешнедиффузионной кинетики. На основе подхода об активированном комплексе, как переходном

состоянии кинетики сорбции, исследован перенос газа, сорбируемого активным элементом. В рамках квантово-статистического гамильтониана изинговского типа для открытой системы адсорбат-адсорбент установлено влияние активированных комплексов на процессы переноса. Установлен порог насыщения степени заполнения поверхности в зависимости от эффективного параметра взаимодействия частиц. Полученные результаты обобщены, полагая стохастичность процессов переноса в системе поток и адсорбат. Проведено сравнение результатов в рамках трех приближений корреляционных эффектов в адсорбате. Проведена количественная оценка численных результатов, дано их сравнение с экспериментальными данными по физической адсорбции газов на кристаллических цеолитах и получено их хорошее согласие.

4. В рамках универсальной модели неидеального бозе-газа, описываемого в квазиклассическом приближении либо в методе самосогласованного поля уравнением Шредингера с полиномиальной нелинейностью, исследована динамика локализованных (солитоноподобных) образований и выявлены пороговые нелинейные явления в конденсированных системах. Для оператора Шредингера исследован вопрос о существовании дискретных уровней энергии, соответствующих солитонам уравнения КдВ с потенциалом специального вида; установлен их пороговый характер образования. В рамках уравнения КдВ изучен распад монохроматических импульсов на солитоны. Предложена процедура аппроксимации гармонических импульсов, показано ее хорошее согласие с результатами численных экспериментов.

5. Исследована дифракция модулированных монохроматических волн (солитонов) в нелинейной дефокусирующей среде. Получено трансцендентное уравнение на собственные значения, учитывающее эффекты солитонной модуляции плоской волны, и проведен его численный анализ. Установлены пороги образования "темных" солитонов для НУШ. На основе численного моделирования установлена неустойчивость солитонов нового типа векторного $u(2)$ НУШ.

6. Построены бозонные представления модели анизотропного ферромагнетика Гейзенберга и изучена эволюция солитоноподобных пузырьков неидеального бозе-газа. В рамках $\Psi^3 - \Psi^5$ НУШ установлена неустойчивость статических пузырей и найдена область устойчивости движущихся пузырей. Изучена динамика одно-, двух- и трехмерных "пузырей в бозе-конденсате" и установлен пороговый характер их динамики соударения. Установлена неустойчивость двух- и трехмерных пузырей. Установлен характер неустойчивости одно-, двух- и трехмерных пузырей в зависимости от выбора начального возмущения. Предложен новый подход к численному анализу нелинейного уравнения Шре-

дингера с полиномиальной нелинейностью.

Апробация работы. Результаты, полученные в диссертации, докладывались и обсуждались на научных семинарах ЛВТА и ЛТФ ОИЯИ, ТГУ и ТПИ (г. Душанбе), ФТИ АН Таджикистана, НИФХИ им. Л. Я. Карпова (г. Москва), НИИ Химии и кафедры физической химии СПбГУ (г. Санкт-Петербург), Санкт-Петербургского отделения российского химического общества им. Д. И. Менделеева, Института математических проблем биологии РАН (г. Пушкино), Института высокопроизводительных вычислительных систем РАН (г. Москва), на XXIII научной конференции факультета физико-математических и естественных наук Университета дружбы народов им. П. Лумумбы (Москва, 1987г.), на III Всесоюзном совещании "Теория солитонов и приложения" (Пушино, 1987г.), на Международном совещании по нелинейным и турбулентным процессам в физике (Киев, 1987г.), на IV Международном симпозиуме по избранным проблемам статистической механики (Дубна, 1987г.), на Международной конференции "Нелинейность и хаос" (Ташкент, 1990г.), на Республиканской конференции молодых ученых (Ленинабад, 1991г.), на Всероссийской конференции "Физико-химические методы исследования структуры и динамики молекулярных систем" (Йошкар-Ола, 1994г.), на Российской научной конференции с участием зарубежных ученых "Математические модели нелинейных возбуждений, переноса, динамики, управления в конденсированных системах" (Тверь, 1994г.), на II Международной конференции по физике низкоразмерных структур "PLDS-2" (Дубна, 1995г.) и на ежегодной научной конференции ТГУ и ТПИ (Душанбе, 1985-1992г.).

Структура работы. Диссертация состоит из введения, шести глав, заключения, списка цитированной литературы. По теме диссертации опубликовано 26 работ, в том числе написан обзор.

Краткое содержание работы. Во введении обсуждается состояние и актуальность проблем, которым посвящена диссертация, сформулирована цель диссертации и перечислены оригинальные результаты, полученные в диссертации.

В первой части (главы 1—3) изучаются и моделируются физико-химические неравновесные сорбционные процессы, которые протекают на границе раздела двух фаз (твердое тело-газ, твердое тело-жидкость и т.п.) и играют существенную роль в широком круге физических и химических явлений.

Глава 1 посвящена изучению процессов переноса в адсорбирующей среде взаимодействующих адатомов и активированных комплексов. Развита единый подход к описанию процессов переноса в одном, двух и трех измерениях применительно к физической адсорбции. Про-

цессы переноса исследуются в открытой системе, когда активный элемент сорбирует из потока газа или жидкости частицы. Под активным элементом при $D = 1$ (D —размерность активного элемента) понимаются, например, полимеры, молекула ДНК и другие квазиодномерные системы; при $D = 2$ —поверхность и при $D = 3$ —кристаллы (в частности, цеолиты) и другие пористые тела.

§1 посвящен анализу экспериментальных данных по теплотам физической адсорбции. Экспериментальные результаты по определению величины теплоты адсорбции газов на поверхности твердых тел, а также и других характеристик (равновесных и динамических) адсорбций газов, показывают, что взаимодействия частиц в адсорбате определяющим образом влияют на экспериментальные зависимости. Этот факт является существенным и указывает на необходимость учета взаимодействия частиц и эффектов корреляции в сорбционной системе при теоретическом анализе и интерпретации экспериментальных данных. С другой стороны, это обстоятельство является важным не только в изучении адсорбционных явлений, но и в исследовании влияния процессов сорбции вещества на динамику переноса.

В §§2 и 3 разработана модель для описания неравновесной динамики сорбции, в которой в явном виде количественно учитываются взаимодействия основных "фаз" системы адсорбат—адсорбент и корреляционные эффекты в системе адатом—адатом и адатом—активированный комплекс (АК). Анализ численных результатов, приведенных в последующих главах, показывает, что их учет приводит к существенно нелинейным режимам формирования концентрационных волн в неравновесной адсорбирующей системе. В основу подхода к описанию процессов переноса в адсорбирующей среде использована модель Изинга с взаимодействием между ближайшими соседями и аппарат квантово-статистических корреляционных функций, примененный впервые к данной модели С.В.Тябликовым и В.К.Федяниным в 1968-1980 годы.

Техника корреляционных функций и модель Изинга

$$H = -\mu \sum_f n_f - \epsilon \sum_{\langle fg \rangle} n_f n_g,$$

конкретизированы для описания неравновесной динамики сорбции в пространствах с числом измерений $D = 1, 2, 3$. Для описания динамики потока газа или жидкости в областях физической адсорбции предложена и численно исследована следующая система уравнений:

$$\frac{\partial \nu}{\partial \tau} + \frac{\partial \theta}{\partial \tau} + (\bar{v} \bar{\nabla}) \nu = d \Delta \nu, \quad (1)$$

$$\bar{v} \bar{\nabla} = v_1 \frac{\partial}{\partial \xi_1} + \dots + v_D \frac{\partial}{\partial \xi_D}, \quad \Delta = \frac{\partial^2}{\partial \xi_1^2} + \dots + \frac{\partial^2}{\partial \xi_D^2},$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial \tau} = v_{ads} - v_{des} = \left\{ \frac{\nu}{ap_0} - 1 \right\} \Phi(T, \epsilon, \epsilon_1, z, \theta), \quad (2)$$

$$\theta = \phi(ap_0)T = \sum_{m=0}^z \frac{z!}{m!(z-m)!} (1-\theta)^{z-m} \theta^m \frac{ap_0}{ap_0 + \exp(-m\beta\epsilon)}. \quad (3)$$

В уравнениях (1)—(3) $\nu(\bar{\xi}, \tau)$ — безразмерная концентрация сорбируемого вещества в газовой (или жидкой) фазе ($\nu = \frac{n}{n_0} = n\gamma$, $\tau = \frac{t}{\tau_0}$); $\theta(\bar{\xi}, \tau)$ — средняя по объему зерен концентрация адсорбата в порах адсорбента; v — средняя линейная скорость газового потока, переносающегося через трубы или колонки с сорбентом; d — коэффициент продольной диффузии; $\Phi(T, \epsilon, \epsilon_1, z, \theta)$ — выражает зависимость скоростей адсорбции и десорбции от температуры в среде, эффективных параметров взаимодействия ϵ адатом—адатом, ϵ_1 адатом—АК; a — коэффициент адсорбции; p_0 — равновесное давление, отвечающее заполнению поверхности θ ; функция $\Psi(\theta)$ определяется видом изотермы сорбции. Конкретный вид всех перечисленных здесь параметров и функций приводится в диссертации (см. ниже в последующем изложении).

Введенные в (1)—(3) параметры $\tau_0 = \frac{J_0 h}{k_B T J} e^{\beta \epsilon_0}$, и $\gamma = \frac{J_0}{J} e^{\beta \epsilon_0}$ определяются характеристиками переходного состояния (активированного комплекса), адсорбата и температурой системы. Параметр γ связывает между собой статсуммы молекулы или атома в газовой фазе и адсорбате и имеет размерность, обратную концентрации ("концентрация в порах сорбента"). Величина $\tau_{chem} = \tau_0$ имеет размерность времени (назовем ее условно "химическим", "характеристическим" временем сорбции). Как будет видно ниже по результатам численных экспериментов, поведение решений системы уравнений (1)—(3) существенно различается при $t \leq \tau_0$ и $t > \tau_0$, т.е. в областях, разделяемых именно временем τ_0 . Введение безразмерных величин ν и τ позволит нам исследовать вместе два взаимно связанных явления: перенос вещества и межфазный сорбционный массообмен. Мы тем самым согласуем динамику двух процессов с разными пространственно-временными масштабами изменения параметров. Система уравнений (1)—(3) дополняется, в зависимости от конкретных физических условий, реализуемых на практике, начальными и граничными условиями. В частности, для

одномерного процесса $D = 1$ выбирались следующие начальные и граничные условия:

$$\nu(\xi, \tau = 0) = 0, \quad \theta(\xi, \tau = 0) = 0, \quad 0 \leq \xi \leq 1; \quad (4)$$

$$\nu(\xi = 0, \tau) = \nu_0, \quad \frac{\partial \nu(1, \tau)}{\partial \xi} = 0, \quad 0 < \tau \leq 1. \quad (5)$$

Условия (4) отвечают "пустой трубе" (или "пустой колонке"), а условия (5) выражают поддерживаемый на торце трубы или колонки режим.

Отличительные черты предложенной модели, уравнения которой составляют (1)—(3), по сравнению с хорошо известными моделями динамики сорбции вещества, заключаются в следующем:

1) она в явном виде учитывает взаимодействия основных "фаз" системы адсорбат—адсорбент, то есть количественно учитывает корреляционные эффекты между адатомами и АК;

2) пригодна при конкретном исследовании процессов переноса с использованием любых типов изотерм;

3) легко обобщается в случаях недиссоциативной и диссоциативной адсорбции и десорбции.

Очень важно, что для предложенной модели размерность системы и наличие внешнего поля не играют никакой роли. Существенно лишь число ближайших соседей, взаимодействующих с данным адатомом: для $D = 1$ имеем $z = 2$ — ближайших соседа, для $D = 2$ — $z = 3, 4, 6$ — и для $D = 3$ — $z = 6, 8, \dots$ — ближайших соседей.

Общие выражения $\Phi(T, \varepsilon, \varepsilon_1, z, \theta)$ и $\Psi(\theta)$ конкретизируются в различных приближениях учета корреляционных эффектов в адсорбате. В работе с целью надежности расчетов и сравнения результатов проведен анализ в рамках трех аппроксимаций: приближение молекулярного поля (ПМП), квазихимическое приближение (КХП) и полиномиальное расщепление (ПР). В частности, для КХП имеем:

$$\frac{1}{a p_0} = \frac{1 - \theta}{\theta} \left(1 - r + r \exp(-\beta \varepsilon) \right)^{-z}, \quad (6)$$

$$r = \frac{\delta - 1 + 2\theta}{\delta + 1}, \quad \delta = \sqrt{(1 - 2\theta)^2 + 4\theta(1 - \theta) \exp(-\beta \varepsilon)},$$

$$\Phi(T, \varepsilon, \varepsilon_1, z, \theta) = \theta(1 + yr)^z, \quad (7)$$

$$y = \exp(\beta \delta \varepsilon) - 1, \quad \delta \varepsilon = \varepsilon_1 - \varepsilon.$$

§4 посвящен обобщению модели взаимодействующих адатомов и активированных комплексов для диссоциативной (двухцентровой) адсорбции и десорбции. Приведена оценка характеристических времен физической сорбции и хемосорбции.

В §5, в качестве первого приближения к описанию переноса вещества, проведен анализ численных результатов для физической адсорбции газов и количественно проанализирована одна из основных равновесных характеристик межфазного сорбционного массообмена: изотерма адсорбции $\theta = \phi(a p_0)_T = \phi(a P)_T$. Равновесные распределения концентраций в открытой сорбционной системе анализируются в трех приближениях учета корреляционных эффектов между сорбируемыми частицами. Исследование равновесных распределений концентраций в системе при $\frac{\partial \theta}{\partial \tau} = 0$, приводит к следующему трансцендентному уравнению:

$$\frac{\theta}{1 - \theta} \left(1 - r + r \exp(-\beta \varepsilon) \right)^z = \nu. \quad (8)$$

Численное решение уравнения (8) при различных фиксированных значениях энергии взаимодействия ε (эВ) и температуры системы $\beta = (k_B T)^{-1}(\text{эВ})^{-1}$, таких что $\beta \varepsilon = 1.0, 1.5, 2.5$, соответственно приведено на рис.1.1–1.3. Результаты вычислений по формуле (8) (т.е. в рамках КХП) изображены сплошными кривыми, в приближении ПР—знаками "+" и в ПМП—пунктирными линиями. Результаты показывают, что при малых энергиях взаимодействия (т.е. при $\beta \varepsilon < 1.0$) все три приближения дают примерно одинаковый результат. С увеличением концентрации ν газа от нуля до ~ 0.2 мы имеем почти экспоненциальный рост покрытия θ до ~ 0.9 . При $\nu > 0.2$ на большом интервале значений концентрации до $\nu \sim 1.5$ наблюдаем медленный переход к режиму насыщения покрытия θ до единицы. Характер зависимости $\theta(\nu)$ существенно меняется при больших энергиях взаимодействия ($\beta \varepsilon > 1.0$) между адатомами. Результаты показывают неоднозначную зависимость $\theta(\nu)$, т.е. сильные взаимодействия между сорбируемыми частицами приводят к существенно нелинейной зависимости степени заполнения поверхности от концентрации в газовой фазе.

Вторая глава посвящена численному изучению динамики переноса газа с учетом влияния "активной поверхности". На основе квантово-статистического гамильтониана изинговского типа для открытой системы адсорбат—адсорбент моделируется перенос газа сорбирующихся частиц. С помощью предложенной в главе 1 модели взаимодействующих адатомов и активированных комплексов численно изучена динамика переноса газа по трубе с сорбентом. Уравнение переноса (материального баланса) для концентрации газа в потоке численно решается совместно с кинетическим уравнением для покрытия поверхности, которое нелинейно зависит от концентрации газа. Для недиссоциативной (физической) адсорбции и десорбции при временах $\tau \leq \tau_0$ выявлен скрытый механизм образования концентрационных волн, обу-

словленный влиянием активной поверхности. Проведен анализ динамики переноса в области совместного влияния внешнедиффузионной кинетики и продольной диффузии. Для различных значений параметра взаимодействия адатом—адатом $\beta\epsilon$, коэффициента продольной диффузии d , продольной скорости газового потока v и числа ближайших соседей—активных центров на поверхности z получены результаты численного решения системы нелинейных уравнений неравновесной динамики сорбции.

§1 посвящен аналитическому исследованию системы нелинейных дифференциальных уравнений динамики сорбции в приближении Ленгмюра.

В §§2 и 3 выявлены особенности динамики сорбции взаимодействующих частиц в областях $\tau > \tau_0$ и $\tau \leq \tau_0$ (τ_0 —характеристическое, "химическое время" сорбции). Полученная в предыдущей главе система нелинейных дифференциальных уравнений в частных производных для процесса сорбции газа или пара вещества, который с постоянной скоростью переносится через трубы или колонки с сорбентом (здесь мы ограничимся случаем $D = 1$) включает в себя следующие уравнения:

1) уравнение материального баланса вещества сорбируемого компонента;

2) уравнение внешнедиффузионной кинетики;

3) уравнения изотермы, а также начальные и граничные условия.

Названная система уравнений в общем виде записывается так:

$$\frac{\partial \nu}{\partial \tau} + \frac{\partial \theta}{\partial \tau} + v \frac{\partial \nu}{\partial \xi} = d \frac{\partial^2 \nu}{\partial \xi^2}, \quad (9)$$

$$0 < \xi < k_1, \quad 0 < \tau = \frac{t}{\tau_0} \leq k_2, \quad k_1, k_2 \geq 1,$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial \tau} = v_{ads} - v_{des} = \left\{ \frac{\nu}{ap_0} - 1 \right\} \Phi(T, \epsilon, \epsilon_1, z, \theta), \quad (10)$$

$$\theta = \phi(ap_0)_T, \quad \frac{1}{ap_0} = \Psi(\theta), \quad (11)$$

$$\nu(\xi, 0) = 0, \quad \theta(\xi, 0) = 0, \quad 0 \leq \xi \leq k_1, \quad (12)$$

$$\nu(0, \tau) = \alpha(\tau) = \nu_0, \quad (13)$$

$$\frac{\partial \nu(k_1, \tau)}{\partial \xi} = 0, \quad 0 < \tau \leq k_2. \quad (14)$$

Анализ прямых расчетов уравнений (9)—(14) неравновесной динамики сорбции указывает, что эволюция взаимно связанных величин

$\theta(\xi, \tau)$ и $\nu(\xi, \tau)$ в начальном этапе процесса сорбции ($\tau < 1.0$) носит существенно нелинейный, нерегулярный характер (то есть в системе возникает характеристическое, "химическое" время межфазного сорбционного массообмена). Кроме того, с увеличением энергии взаимодействия адатомов (т.е. при $\beta\epsilon > 1.0$) растет скорость перемещения фронта концентрационной волны в потоке. Аналогичная картина наблюдается и для степени заполнения поверхности $\theta(\xi, \tau)$ (при $\beta\epsilon = 1.5$, к примеру, мы приходим к большему значению насыщения θ_s , чем при $\beta\epsilon = 1.0$).

Проведен анализ системы нелинейных уравнений (9)—(14) в областях $t \leq \tau_0$ с целью выявления эффекта возникновения "химического" времени и его влияния на процессы переноса в неравновесной адсорбирующей системе. Численные расчеты были выполнены при различных значениях параметров взаимодействия адатом—адатом $\beta\epsilon$, адатом—АК $\beta\delta\epsilon \equiv \beta(\epsilon_1 - \epsilon)$, коэффициента продольной диффузии d , продольной скорости газового потока v и числа ближайших соседей—активных центров на поверхности z .

Чтобы четко выделить вклад каждого из вышеперечисленных параметров на динамику переноса адсорбирующихся частиц, все расчеты проводились при одинаковом постоянном значении концентрации газа на входе в трубку $\nu(\xi = 0, \tau) = \nu_0 = 0.2$. Значение $\nu_0 = 0.2$ выбиралось на основе данных §4 предыдущей главы, где были рассмотрены стационарные значения покрытия при заданном равновесном распределении концентрации газа, т.е. когда $\frac{\partial \theta}{\partial \tau} = 0$. Как показывают результаты определения изотермы газа для различных фиксированных значений энергии взаимодействия адатомов ϵ (эВ) и температуры системы $\beta = (k_B T)^{-1} (\text{эВ})^{-1}$, зависимость $\theta(\nu)$ при больших энергиях взаимодействия между адатомами становится неоднозначной, т.е. сильные взаимодействия между сорбируемыми частицами приводит к существенно нелинейной зависимости покрытия от концентрации (такая зависимость аналогична режиму "странных аттракторов" в теории нелинейных волновых процессов). Следовательно, основываясь на эти результаты в первую очередь были исследованы эволюции концентрации газа $\nu(\xi, \tau)$ и покрытия поверхности $\theta(\xi, \tau)$ в зависимости от параметра $\beta\epsilon$.

На рис.2.1–2.3 представлены результаты численного решения системы уравнений (9)—(14) для пяти моментов времени: $\tau = 0.2, 0.4, 0.6, 0.8$ и 1.0 . Результаты, представленные на рис.2.1–2.3, получены при фиксированных значениях $\beta\delta\epsilon = 0.5$, $d = 0$, $v = 1$, $z = 4$ и соответственно следующих значениях параметра взаимодействия между сорбируемыми частицами $\beta\epsilon = 1.0, 1.5, 2.0$. Видно, что с увеличением

параметра $\beta\epsilon$ ($\eta_{cr} = \beta\epsilon > 1.5$) концентрационный профиль в газовой фазе отклоняется от равномерного и принимает форму скачка. Аналогичные картины были обнаружены и при увеличении $\beta\delta\epsilon$ или z , фиксируя при этом другие параметры системы. Таким образом, в рамках исследуемой модели, однозначно наблюдается возникновение концентрационных волн при учете сильных взаимодействий в адсорбате. Следует отметить, что скачки концентраций имеют место при тех же значениях $\beta\epsilon$, когда в системе появляется "странный аттрактор". То есть налицо определенная корреляция между этими двумя режимами. Существенно, что скачкообразное поведение концентрации в потоке ограничено сорбционным временным интервалом $t \leq \tau_0$. В областях $\tau > 1.0$ ($t > \tau_0$), как уже отмечено выше, мы будем иметь равномерное распределение $\nu(\xi, \tau)$ по всей длине трубки. Анализ полученных результатов дает основания предположить о скрытом механизме формирования волн концентраций, обусловленном влиянием активной поверхности.

Далее исследован перенос газа в области совместного влияния внешней и продольной диффузии при значениях коэффициента диффузии $d = 0.001, 0.05, 0.5$ и фиксированных значений $\beta\epsilon = 2.0, \beta\delta\epsilon = 0.5, v = 1, z = 4$. Получено, что при малых значениях $d < 0.1$ лимитирующей стадией по-прежнему является внешняя диффузия. Однако с увеличением $d > 0.1$ концентрационные скачки постепенно сглаживаются из-за преобладания продольной диффузии над внешнедиффузионным массопереносом. То есть в данной области изменения параметров системы продольная диффузия становится лимитирующей стадией процесса.

В §4 на основе подхода об активированном комплексе, как переходном состоянии кинетики сорбции, исследован перенос частиц газа, сорбируемых активной поверхностью и изучено влияние АК на процессы переноса. Получены количественные кривые для концентрации газа и степени заполнения поверхности в зависимости от эффективных параметров взаимодействия $\beta\epsilon$ адатом-адатом и $\beta\delta\epsilon$ адатом-активированный комплекс. Выявлены и проанализированы режимы образования концентрационных волн. Несмотря на то, что вклады эффективных параметров $\beta\delta\epsilon$ и $\beta\epsilon$ на эволюцию $\theta(\xi, \tau)$ в рамках трех вышеназванных аппроксимаций корреляционных эффектов подчиняются почти одинаковому экспоненциальному закону, получено, что изменение $\beta\delta\epsilon$ не влияет на динамику покрытия $\theta(\xi, \tau)$. Это указывает на то, что, во-первых, заполнение поверхности адатомами произойдет после образования "фазы" активированного состояния и, во-вторых, что исследуемая модель хорошо описывает основные свойства сорбирующего газа. Анализ результатов также показывает, что образование концентрационных скачков происходит при значениях $\beta\epsilon \approx 0.1 \div 0.5$ и $\beta\delta\epsilon < \eta_{cr}$.

Для исследуемой безактивационной физической адсорбции с небольшими энергиями взаимодействия адатомов последнее представляется более оптимальным режимом возбуждения волн концентраций. Таким образом, вклад активированных комплексов на динамику переноса газа также важен для формирования концентрационных волн в системе и он в действительности несколько уменьшает по сравнению с η_{cr} верхний энергетический предел их образования за счет взаимодействия адатомы-АК.

В §5 представлены численные результаты возможности существования порога для насыщения заполнения поверхности в зависимости от эффективного параметра взаимодействия адатомов в сорбирующей системе.

Результаты вычислений изотермы газа, приведенные на рис.1.1-1.3, показывают, что изотермы адсорбции при больших значениях $\beta\epsilon$ принимают S-образную форму. Форма изотермы для произвольной адсорбирующей среды определяется энергией взаимодействия адатомов в системе адсорбат-адсорбент. Общеизвестно, что такая форма указывает на существование равновесия между двумя фазами и соответствует фазовому переходу первого рода (например, переходу жидкость-пар), где основную роль играют силы притяжения между молекулами. С другой стороны, S-образные изотермы адсорбции выражают стремительное заполнение полости адсорбента (например, при адсорбции газов на поверхности цеолитов), и быстрая адсорбция как раз и обязана сильным взаимодействиям (притяжениям) частиц в адсорбате. Применяя результаты численного решения системы уравнений (9)-(14), полученные для физической адсорбции газов, получим следующую однозначную зависимость максимального значения (насыщения) адсорбции θ_s (степени заполнения поверхности) от интенсивности взаимодействия адатомов $\beta\epsilon$ (рис.3) Из рис.3 нетрудно видеть что взаимодействие адатомов существенно влияет на процесс адсорбции, и увеличение параметра $\beta\epsilon$ приводит, соответственно, к большим значениям адсорбции газа. Проведенный анализ также показывает, что время t_s достижения максимального значения θ_s адсорбции для тех же значений $\beta\epsilon$ стремительно падает с ростом $\beta\epsilon$ (рис.4). Из этих результатов нетрудно видеть, что существует порог $\eta_{cr} \equiv (\beta\epsilon)_{cr} > 1.0$ для значений $\beta\epsilon$, в зависимости от которого степень заполнения поверхности достигает предельное значение $\theta \rightarrow 1$. очень быстро. То есть взаимодействия адсорбированных атомов или молекул в неравновесной системе приводит к быстрой адсорбции и к более высоким значениям θ_s . В областях $\beta \geq \eta_{cr}$, как видно из рисунков 3 и 4, кривая зависимости $\theta_s = f(\tau)$ с увеличением $\beta\epsilon$ претерпевает скачок от $\theta_s = 0$ до $\theta_s \sim 1$ при $\tau < 1$. Такая

картина адсорбции газа соответствует экспериментальным данным в цеолитах. Как известно, адсорбция многих газов (например, O_2 , N_2 , Ar , He и т.д.) на цеолитных адсорбентах характеризуются быстрыми скоростями. Среди других факторов (таких как температура, размер частиц, давление и т.д.) немаловажную роль здесь играет взаимодействия частиц в адсорбате. В результате быстрой адсорбции на внешней поверхности наблюдается скачок, особенно в случае адсорбции при низких температурах. Этот скачок связан с адсорбцией на внешней поверхности кристаллов и может использоваться для определения указанной поверхности. Таким образом, мы наблюдаем хорошее согласие численных результатов с некоторыми экспериментальными результатами по динамической адсорбции газов в цеолитных адсорбентах.

В третьей главе проводится численное моделирование процессов массопереноса в адсорбционной системе случайно взаимодействующих адатомов. Полученные в предыдущих главах результаты по изучению динамики переноса газа, обобщаются, полагая стохастичность адсорбционных процессов в открытой системе. Стохастический процесс в системе адсорбат—адсорбент моделируется введением временных и пространственных случайных взаимодействий адатом—адатом ($\eta \equiv \beta\varepsilon$, $\beta = (k_B T)^{-1}$) и адатом—активированный комплекс ($\eta_1 \equiv \beta\varepsilon_1$).

§1 посвящен обсуждению постановки задачи и моделированию случайных процессов в адсорбционной системе.

В §§2 и 3 изучена динамика переноса газа в сорбционной системе при случайных временных и пространственных взаимодействиях адатомов. При этом исследованы как пространственное

$$\eta \rightarrow \eta(\vec{\xi}) = \eta_0 + \tilde{\eta}(\vec{\xi}), \quad \eta_1 \rightarrow \eta_1(\vec{\xi}) = \eta_{10} + \tilde{\eta}_1(\vec{\xi}),$$

так и временное,

$$\eta \rightarrow \eta(\tau) = \eta_0 + \tilde{\eta}(\tau), \quad \eta_1 \rightarrow \eta_1(\tau) = \eta_{10} + \tilde{\eta}_1(\tau),$$

случайные взаимодействия в системе. В приведенных выражениях η_0 , η_{10} —суть постоянные величины, задающие верхние пределы интенсивностей взаимодействия адатом—адатом и адатом—АК ($\eta_0 = \langle \eta \rangle$, $\eta_{10} = \langle \eta_1 \rangle$) и $\tilde{\eta}$, $\tilde{\eta}_1$ являются случайными величинами ($\langle \tilde{\eta} \rangle = 0$, $\langle \tilde{\eta}_1 \rangle = 0$). В численных расчетах моделировались различные распределения случайных взаимодействий в системе:

$$\tilde{\eta} = (2\tilde{n} - 1)\sigma_0, \quad \tilde{\eta}_1 = (2\tilde{n} - 1)\sigma_{10},$$

где $\sigma_0 = \frac{\eta_0}{k}$, $\sigma_{10} = \frac{\eta_{10}}{k}$, $k = 1, 2, \dots, 10$ и \tilde{n} —это случайное число, принимающее в пространственном и временном интервалах значения от 0

до 1. Распределение \tilde{n} задается генератором случайных чисел, причем оно равномерно в интервале $[0 \div 1]$.

Система нелинейных уравнений (9)–(14) при $D = 1$ в трех вышеперечисленных приближениях учета взаимодействия между адатомами была решена численно конечно-разностными методами на ЭВМ. Эволюция концентраций $\langle \nu(\xi, \tau) \rangle$ и $\langle \theta(\xi, \tau) \rangle$ при временных случайных взаимодействиях адатомов изучалась на достаточно больших промежутках времени $\tau \gg 1$, ($t \gg \tau_0$) и расстояниях $\xi \gg 1$, ($x \gg L$). Расчеты проводились при различных значениях параметров $\beta\varepsilon_0$ и $\beta\varepsilon_{10}$. При очень быстрых изменениях $\beta\varepsilon$ и $\beta\varepsilon_1$ (см. рис.5) система "не успевает" реагировать, и в итоге мы получим ту же картину эволюции $\nu(\xi, \tau)$ и $\theta(\xi, \tau)$, что и при $\beta\varepsilon, \beta\varepsilon_1 = const$. Поэтому случайные значения $\beta\varepsilon$ и $\beta\varepsilon_1$ выбирались с некоторой заметной продолжительностью $\tau^* = K\Delta\tau$, где $\Delta\tau$ — шаг дискретизации разностной схемы и $K \gg 1$ (см. рис.6). Расчеты были выполнены для значений $K = 100; 500; 1000$ и 10000, и динамика системы во всех случаях почти одинакова. Как показывают полученные результаты, концентрации в газовом потоке и в сорбенте со временем меняются скачкообразно. В тех точках, где увеличивается значение покрытия $\langle \theta(\xi, \tau) \rangle$ поверхности, происходит уменьшение концентрации $\langle \nu(\xi, \tau) \rangle$ в газовом потоке.

Изучен стохастический перенос газа при взаимодействиях адатомов, случайных в пространстве. При всех значениях $\beta\varepsilon_0 < \eta_{cr}$ мы наблюдаем очень быстрые скачкообразные изменения концентрации в сорбенте, за которыми не успевает реагировать концентрация в газовой фазе. Эволюция $\langle \nu(\xi, \tau) \rangle$ происходит почти равномерно. Таким образом, введение пространственно-временных случайных взаимодействий в системе адсорбат—адсорбент существенным образом влияют на процессы переноса. Однако временная и пространственная стохастичность приводят к совершенно различным режимам формирования концентрационных волн в системе. При случайных временных изменениях эффективных параметров взаимодействия адатом—адатом и адатом—АК происходят скачкообразные временные изменения концентраций как в газовой фазе, так и в адсорбате. В случае же взаимодействия адатомов, случайных в пространстве, в адсорбате возбуждаются очень быстрые концентрационные скачки, тогда как концентрация в газовой фазе почти не успевает за этими изменениями. Важно, что концентрационные волны, генерируемые при случайных временных и пространственных взаимодействиях адатомов, представляют собой достаточно долгоживущие и устойчивые образования в открытой сорбирующей системе.

В §4 исследован двумерный перенос газа с учетом стохастичности

адсорбционных процессов и получены картины образования концентрационных волн в открытой системе. Приводятся сравнения динамики эволюции концентрационных величин в $1D$ и $2D$ сорбционных стохастических системах. Результаты, полученные в §§2 и 3, здесь обобщаются только для $2D$ пространственных случайных взаимодействиях. Анализ полученных результатов показывает, что динамика системы существенно зависит от величины $\eta_0 = \langle \eta(\xi) \rangle$, как и в случае $\eta = \beta\varepsilon = const$. То есть:

1) когда $\eta_0 < \eta_{cr}$, мы наблюдаем устойчивые осцилляции концентрации $\langle \theta(\xi, \tau) \rangle \equiv f(\eta(\xi))$ в адсорбате для больших времен $\tau \gg 1$ ($t \gg \tau_0$), которые происходят по тому же закону, что и распределение случайных чисел $\eta(\xi)$;

2) когда $\eta_0 \geq \eta_{cr}$, колебания $\langle \theta(\xi, \tau) \rangle \equiv f(\eta(\xi))$ имеют место только в промежутке $\tau \leq \tau_{chem}$; для времен $\tau > \tau_{chem}$ имеем равномерное распределение концентрации $\langle \theta(\xi, \tau) \rangle$ в порах сорбента.

Однако в обоих перечисленных случаях волнообразное эволюция концентрации $\langle \nu(\xi, \tau) \rangle$, подобно "скрытому механизму" при $D = 1$ физической сорбции (Глава 2), наблюдается в интервале $\tau \in [0 \div 1]$ ($t \in [0 \div \tau_{chem}]$). При $\tau > \tau_{chem}$ эволюция концентрации $\langle \nu(\xi, \tau) \rangle$ в газовой фазе достигает равномерного распределения. На основе сравнения результатов по динамике переноса газа в одномерной и двумерной стохастических сорбционных системах приходим к следующим заключениям:

1) динамика эволюции концентраций в сорбирующей системе при случайных взаимодействиях адатомов зависит от отношения $\eta_0 < \eta_{cr}$ и $\eta_0 > \eta_{cr}$ ($\eta_0 = \langle \eta(\xi) \rangle = \langle \beta\varepsilon(\xi) \rangle$);

2) в случае $\eta_0 < \eta_{cr}$ наблюдаются колебания концентрации $\langle \theta \rangle$ в адсорбате, которые не влияют на эволюцию концентрации $\langle \nu \rangle$ в газовом потоке;

3) для $\eta_0 > \eta_{cr}$ волнообразные колебания концентраций $\langle \theta \rangle$ и $\langle \nu \rangle$ ограничены химическим временным интервалом $t \leq \tau_{chem}$;

4) нелинейные колебания концентрации газа $\langle \nu \rangle$ во всех случаях имеют место до момента $t \rightarrow \tau_0$, т.е. как и в случае $\beta\varepsilon = const$ динамика системы определяется химическим временем $\tau_{chem} = \tau_0$.

Вторая часть диссертации (главы 4—6) посвящена моделированию нелинейных эффектов в рамках полевых моделей физики конденсированного состояния и нелинейной оптики.

В четвертой главе изучена динамика солитонов в некоторых физических системах, описываемых уравнением КдВ, НУШ и векторным $u(2)$ НУШ, где процесс образования солитонов имеет пороговый ха-

рактер.

Исследована нелинейная динамика в диспергирующих средах, описываемых уравнением КдВ

$$u_t + 6uu_x + u_{xxx} = 0, \quad (15)$$

на примере возможности генерации солитонов при распаде начальных монохроматических импульсов в виде нечетных функций следующего типа: 1) прямоугольный импульс—яма и барьер; 2) синусоидальный импульс $u(x, 0) = \tilde{u}_0 \sin kx$, $x \in [-\frac{\pi}{k}, \frac{\pi}{k}]$; 3) импульс Рэлея $u(x, 0) = \tilde{u}_0 x \exp(-k^2 x^2)$.

При использовании линейного представления уравнения КдВ задача сводится к нахождению дискретных уровней энергии в прямоугольном потенциале $u(x)$ "нулевой площади" для уравнения Шредингера:

$$-\Psi_{xx} + u(x)\Psi = E\Psi.$$

Получено следующее трансцендентное уравнение на собственные значения E :

$$|E| = (u - |E|) \left\{ \frac{f(E) \operatorname{ctg}[(u - |E|)^{\frac{1}{2}} a] + 1}{\operatorname{ctg}[(u - |E|)^{\frac{1}{2}} a] - f(E)} \right\}^2, \quad (16)$$

где a — ширина ямы, $f(|E|)$ — функция E .

Проведен численный анализ уравнения (16) и установлен порог образования дискретного уровня энергии.

Для синусоидального импульса трансцендентное уравнение (16) дает следующие условия:

- а) $\tilde{u}_0 \geq 0.392k^2$ — рождение солитона;
- б) $\tilde{u}_0 < 0.159k^2$ — отсутствие солитона.

Для импульса Рэлея, соответственно, имеем следующие условия:

- а) $\tilde{u}_0 \geq 2.8k^3$ — рождение солитона;
- б) $\tilde{u}_0 < 0.9k^3$ — отсутствие солитона.

В рамках уравнения КдВ проведено численное моделирование динамики распада вышеотмеченных монохроматических импульсов на солитоны, дано сравнение результатов прямых численных расчетов динамики КдВ-солитонов с данными аналитических расчетов дискретных уровней энергии в уравнение Шредингера; получено их хорошее согласие.

Задача об образовании "темных солитонов" в рамках нелинейного уравнения Шредингера отталкивающего типа

$$iu_t + u_{xx} - 2(|u|^2 - 1)u = 0 \quad (17)$$

с помощью линейного представления НУШ сведена к дифракции модулированных монохроматических волн (солитонов) в нелинейной дефокусирующей среде. Получено следующее трансцендентное уравнение на собственные значения $\lambda(\lambda_0, d)$:

$$\cos 2\lambda d = \pm \frac{\lambda + f_1(\lambda, \lambda_0, d)}{\sqrt{1 + f_2(\lambda, \lambda_0, d)}}, \quad (18)$$

где λ_0 определяет ширину солитона ($\nu_0 = \sqrt{1 - \lambda_0^2}$ — обратная ширина солитона), а функции $f_1(\lambda, \lambda_0, d)$ и $f_2(\lambda, \lambda_0, d)$ связаны с солитонной модуляцией плоской волны. Проведен численный анализ характеристического уравнения (18) и изучены особенности дифракции солитона по сравнению с дифракцией плоской волны.

Исследована устойчивость солитонов векторного $u(2)$ НУШ вида

$$\Psi^{II} = \begin{pmatrix} C_1 \exp(4i\lambda^2 t) \operatorname{sech} \lambda(x - x_0) \\ C_2 \exp(i\lambda^2 t) \end{pmatrix} \operatorname{sech}^2 \lambda(x - x_0), \quad (19)$$

$$|C_1|^2 = |C_2|^2 = 6\lambda^2.$$

Как показывают расчеты, двусолитонные решения (19) $u(2)$ НУШ

$$\begin{aligned} i\Psi_t^{(1)} + \Psi_{xx}^{(1)} + (|\Psi^{(1)}|^2 + |\Psi^{(2)}|^2)\Psi^{(1)} &= 0 \\ i\Psi_t^{(2)} + \Psi_{xx}^{(2)} + (|\Psi^{(1)}|^2 + |\Psi^{(2)}|^2)\Psi^{(2)} &= 0 \end{aligned}$$

при малых значениях параметра λ , определяющего амплитуду и ширину солитонов, являются долгоживущими объектами. При больших значениях λ ($\lambda > 0.5$) эти солитоны оказываются неустойчивыми и время их распада растет с уменьшением их амплитуды.

В пятой главе построены бозонные представления анизотропной модели Гейзенберга и изучена эволюция солитоноподобных возмущений ("пузырей в конденсате") неидеального бозе-газа. Для изотропной многоподрешеточной XY-цепочки с магнотонно-фононным взаимодействием в длиноволновом приближении получены нелинейные системы уравнений и описаны ее солитонные решения при различных граничных условиях. Получено представление модели Гейзенберга, описываемой в континуальном пределе классическим уравнением Ландау-Лифшица (УЛЛ)

$$iM_t = \frac{1}{2}[M, M_{xx}] + \frac{\beta}{4}[M, \sigma^{(3)}]\{M, \sigma^{(3)}\}, \quad (20)$$

$$M = \begin{pmatrix} M^{(z)} & M^{(-)} \\ M^{(+)} & -M^{(z)} \end{pmatrix} (x, t) \in SU(2),$$

$$M^{(\pm)} = M^{(x)} \pm iM^{(y)}, \quad M^2 = I$$

в терминах неидеального бозе-газа посредством сферической проекции вектора намагниченности \vec{M} на комплексную плоскость. Установлена связь между решениями НУШ, калибровочно-эквивалентного УЛЛ и модифицированного НУШ, связанного с УЛЛ посредством точного преобразования сферической проекции.

Численно изучена эволюция статических ($v = 0$) солитоноподобных пузырьков

$$\varphi_s(x) = \sqrt{r_0} \frac{\cosh(\frac{c}{2}x)}{\sqrt{\frac{r_0}{A} + \sinh^2(\frac{c}{2}x)}}, \quad (21)$$

где $c = 2\sqrt{r_0(r_0 - A)}$ — скорость звука в конденсате, $0 < A < r_0$, в рамках $\Psi^3 - \Psi^5$ НУШ:

$$i\varphi_t + \varphi_{xx} - r_0(2A + r_0)\varphi + 2(A + 2r_0)|\varphi|^2\varphi - 3|\varphi|^4\varphi = 0, \quad (22)$$

описывающего бозе-газ с двух- и трехчастичным взаимодействием бозонов. Установлено, что покоящийся пузырек (21) неустойчив, причем одна из мод его распада приводит к разрушению основного состояния ("конденсата").

Исследована устойчивость движущегося пузырька:

$$\varphi(x, t) = \sqrt{2r_0} \frac{\cosh(\tilde{x} - i\mu)}{\sqrt{\frac{2r_0 - A}{\sqrt{A^2 + v^2}} + \cosh 2\tilde{x}}}, \quad (22)$$

где $\tilde{x} = \frac{\sqrt{c^2 - v^2}}{2}(x - vt - x_0)$, $\cos 2\mu = \frac{Ar_0 + \frac{v^2}{2}}{r_0\sqrt{A^2 + v^2}}$, $0 < \mu < \frac{\pi}{2}$ при различных значениях параметра A и скорости пузырька v . Найдена область, в которой движущийся пузырек (22) представляет собой достаточно стабильный и долгоживущий объект.

В шестой главе представлены результаты по динамике одно-, двух- и трехмерных "пузырей в конденсате". С помощью численного моделирования изучены столкновения пузырей (22) и установлен пороговый характер их динамики соударения.

Изучена эволюция двух- и трехмерных пузырей и установлена их неустойчивость.

Изучен характер неустойчивости одно-, двух- и трехмерных "пузырей в конденсате" в зависимости от их начального возмущения. В одномерном случае при специальном выборе начального возмущения одна из мод неустойчивости статического пузырька (21) приводит к ее развалу

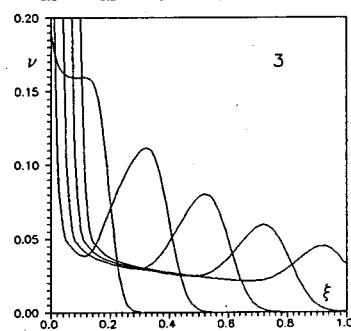
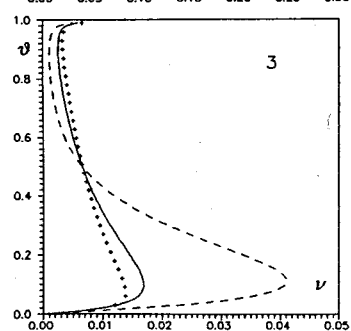
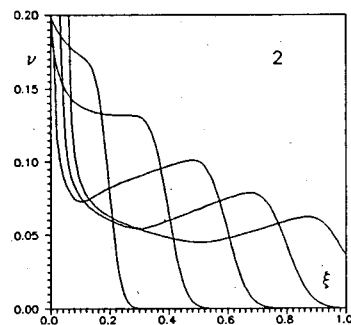
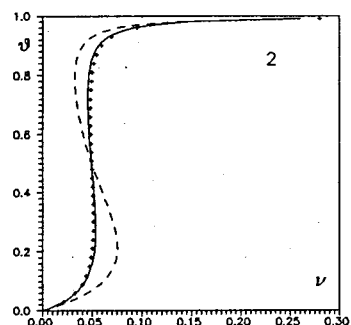
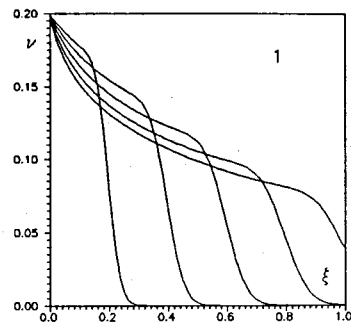
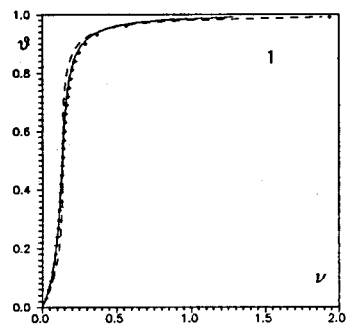


Рис.1

Рис.2

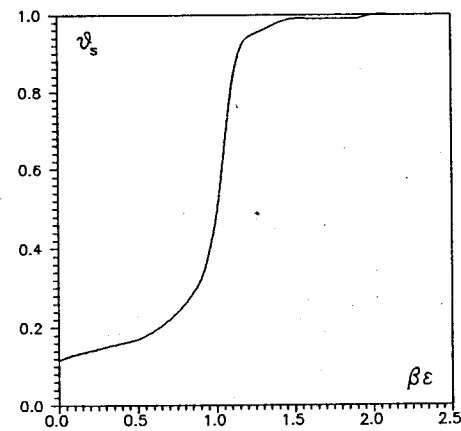


Рис.3

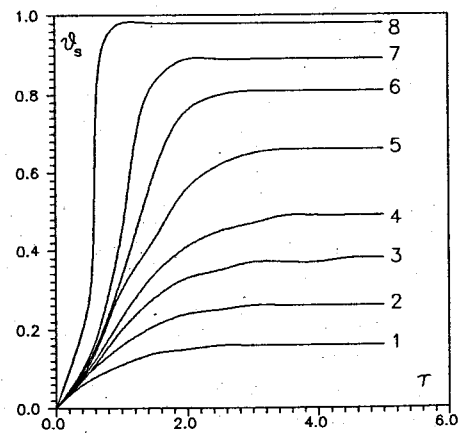


Рис.4

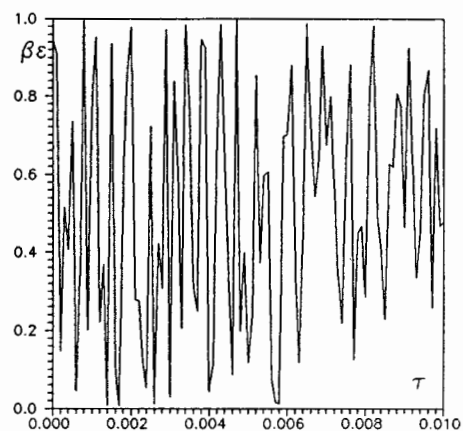


Рис.5

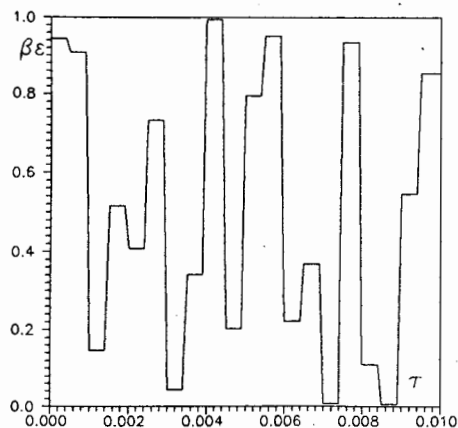


Рис.6

на два разбегающихся устойчивых солитоноподобных пузыря. При начальном возмущении двух- и трехмерных пузырей соответственно образуются затухающие цилиндрические и сферические волны, распространяющиеся по конденсату.

Изложен новый подход к численному анализу нестационарного уравнения Шредингера с полиномиальной нелинейностью. Используя идею "продолжения по параметру" для уравнения Шредингера

$$i\psi_t + \psi_{xx} + Tf(|\psi|^2)\psi = 0,$$

где $f(|\psi|^2)$ - полином n -ой степени, вводится параметрическая зависимость от T . Основная идея предложенной схемы заключается в том, что численное решение всех ψ^{2n+1} НУШ может быть проведено на основе единой линейной задачи. Стартуя с одного и того же начального условия при $T = 0$, мы приходим в зависимости от типа нелинейности к различным результатам при $T = 1$.

Для проведения численных экспериментов, результаты которых изложены выше, были разработаны соответствующие алгоритмы, основанные на эффективных методах численного интегрирования нелинейных дифференциальных уравнений в частных производных. Численное решение эволюционных уравнений, описанных в главах 1–6, было проведено методом конечных разностей на основе разностных схем явного и неявного типа. В расчетах были применены схемы повышенного порядка точности как по пространственным, так и по временным переменным. Реализация разработанных алгоритмов осуществлялась на базе прямых и итерационных методов решений системы уравнений. Точность и сходимость решений аппроксимирующих разностных уравнений проверялись на основе общепринятых критериев проверки надежности машинных вычислений.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ДИССЕРТАЦИИ ОПУБЛИКОВАНЫ В СЛЕДУЮЩИХ РАБОТАХ:

1. Маханьков В.Г., Пашаев О.К., Холмуродов Х.Т. Процесс образования солитонов при распаде монохроматической волны в рамках уравнения Кортевега–де Фриза. Численный эксперимент. Сообщения ОИЯИ, Р5-85-561, Дубна, 1985.
2. В.Г.Маханьков В.Г., Пашаев О.К., Холмуродов Х.Т. Процесс образования солитонов при распаде монохроматической волны в рамках уравнения Кортевега–де Фриза. Теория. Сообщения ОИЯИ, Р5-85-562, Дубна, 1985.

3. Kholmurodov Kh.T., Makhankov V.G., Pashaev O.K. Threshold of KDV soliton production. Preprint JINR, E5-87-784, Dubna, 1987; Physica Scripta, 1989, v.39, p.9-12.
4. Пашаев О.К., Мырзакулов Р., Холмуродов Х.Т. Частицеподобные возбуждения в многокомпонентной магнон-фононной системе. Препринт ОИЯИ, P5-85-317, Дубна, 1985.
5. Барашенков И.В., Холмуродов Х.Т. Бозе-газ с парным и трехчастичным взаимодействием: эволюция нестабильных "пузырьков". Сообщения ОИЯИ, P5-86-698, Дубна, 1986.
6. Pashaev O.K., Myrzakulov R., Kholmurodov Kh.T. Particle-like excitations in many component magnon-phonon systems. Physica Scripta, 1986, v.33, p.9-12.
7. Makhankov V.G., Kholmurodov Kh.T. Condensate stability in Bose-gas model with two- and three-particle interactions. Preprint JINR, E17-87-861, Dubna, 1987.
8. Пашаев О.К., Хакимов Ф.Х., Холмуродов Х.Т. Дифракция солитона в нелинейной дефокусирующей среде. Препринт ОИЯИ, P5-85-155, Дубна, 1987; Известия АН Тадж. ССР, N1, 1988, с.69.
9. Абдуллоев Х.О., Хакимов Ф.Х., Холмуродов Х.Т. Некоторые точные соотношения между интегрируемыми моделями анизотропного ферромагнетика и неидеального бозе-газа. Известия АН Тадж. ССР, N1, 1987, с.103.
10. Барашенков И.В., Холмуродов Х.Т. Бозе-газ с парным и трехчастичным взаимодействием: эволюция солитоноподобных "пузырьков". В кн.: Тезисы IV Международного симпозиума по избранным проблемам статистической механики. ОИЯИ, D17-87-477, Дубна, 1987.
11. Маханьков В.Г., Холмуродов Х.Т. Численное моделирование устойчивости векторных $u(2)$ -солитонов. В сб.: Краткие сообщения ОИЯИ, N5-87, 1987.
12. Барашенков И.В., Холмуродов Х.Т. Бозе-газ с парным и трехчастичным взаимодействием: эволюция солитоноподобных "пузырьков" ($D > 1$). В кн.: Труды IV Международного симпозиума по избранным проблемам статистической механики. ОИЯИ, Дубна, 1987.

13. Абдуллоев Х.О., Маханьков В.Г., Хакимов Ф.Х., Холмуродов Х.Т. Динамика столкновения пузырей-солитонов в рамках $\Psi^3 - \Psi^5$ -нелинейного уравнения Шредингера. Известия АН Тадж. ССР, N4, 1987, с.32.
14. В.Г.Маханьков В.Г., Холмуродов Х.Т. Устойчивость конденсата в рамках модели бозе-газа с двух- и трехчастичным взаимодействием. Физика низких температур, 1989, 15, N1, с.72.
15. Abdulloev Kh.O., Khakimov F.Kh., Makhankov V.G., Kholmurodov Kh.T. Numerical simulation of bubble collisions based on $\varphi^4 - \varphi^6$ -model. In: Proceedings of the III International Workshop "Nonlinear and turbulent processes in physics", Naukova Dumka, Kiev, 1988, pp.16-18.
16. Пашаев О.К., Хакимов Ф.Х., Холмуродов Х.Т. Пороговый характер образования солитонов в континуальной модели ангармонической цепочки. Доклады АН Тадж. ССР, том XXXIV, N6, 1991, с.359.
17. Пузынин И.В., Федянин В.К., Холмуродов Х.Т. Численный анализ процессов в адсорбционной системе с активной поверхностью. Препринт ОИЯИ, P17-94-135, Дубна, 1994.
18. Kholmurodov Kh.T., Fedyanin V.K., Puzynin I.V. Simulation of non-equilibrium sorption dynamics of the interacting particles. JINR Rapid Communication, N1 [64]-94, Dubna, 1994.
19. Пузынин И.В., Федянин В.К., Холмуродов Х.Т. Особенности динамики сорбции взаимодействующих частиц. Журнал физической химии, 1995. Т.69. N 3. С.492- 495.
20. Федянин В.К., Пузынин И.В., Холмуродов Х.Т. Моделирование динамики переноса газа с учетом влияния активной поверхности. Журнал физической химии, 1995. Т.69. N 8. С.1480-1484.
21. Федянин В.К., Пузынин И.В., Холмуродов Х.Т. Влияние активированных комплексов в открытой системе адсорбат-адсорбент на процессы переноса. Журнал физической химии, 1996 (в печати); Препринт ОИЯИ, P17-95-405, Дубна, 1995.
22. Федянин В.К., Пузынин И.В., Холмуродов Х.Т. Процессы переноса в сорбирующей системе случайно взаимодействующих адатомов. Журнал физической химии, 1996 (в печати); Препринт ОИЯИ, P17-95-406, Дубна, 1995.

23. Kholmurodov Kh.T., Fedyanin V.K., Puzynin I.V. Active surface and transfer processes in gas dynamics. Preprint JINR, E17-95-442, Dubna, 1995; Proc. of 2nd Int. Conf. "PLDS-2", Dubna, 1995; J. "Phys. Low-Dim. Struct.", **10/11(1995)**pp.181-186.
24. Холмуродов Х.Т. О новом подходе к исследованию процессов переноса в адсорбирующей среде с учетом взаимодействия частиц в адсорбате. Сообщения ОИЯИ, P17-95-437, Дубна, 1995.
25. Kholmurodov Kh.T., Puzynin I.V., Smirnov Yu.S. A new approach to numerical solution of the nonstationary Schroedinger equation with polynomial nonlinearity. Preprint JINR, E5-95-441, Dubna, 1995.
26. Kholmurodov Kh.T., Fedyanin V.K., Puzynin I.V. 2D gas transfer dynamics in an adsorbate-adsorbent open system of the interacting adatoms. Preprint JINR, E17-95-491, Dubna, 1995.

Рукопись поступила в издательский отдел
18 марта 1996 года.