

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.

Статья Гасникова А. В., Горбунова Э. А., Ковалева Д. А., Мохаммеда А. А. М. и Черноусовой Е. О. об обосновании гипотезы об оптимальных оценках скорости сходимости численных методов выпуклой оптимизации высоких порядков посвящена оптимальным численным методам решения задачи выпуклой безусловной оптимизации, использующим старшие производные оптимизируемой функции. Опираясь на результаты Р. Монтейро и Б. Свайтера, опубликованные в 2013 году, и Ю. Е. Нестерова, опубликованные в 2018 году, авторы построили алгоритм решения задачи выпуклой безусловной оптимизации, улучшающий как сходимость метода, хотя и немного, так и порядок (степень) сходимости почти в полтора раза. Также в работе обсуждаются возможные направления развития полученных результатов и их обобщения на более широкий класс задач.

Статья Шаклеина А. А., Карпова А. И. и Болкисева А. А. об анализе численного метода решения задачи о распространении пламени по вертикальной поверхности горючего материала посвящена математическому моделированию распространения пламени по поверхности горючего материала. В работе решаются двумерные уравнения Навье–Стокса для многокомпонентной химически реагирующей газовой смеси с учетом ряда физических процессов. Авторы исследуют особенности использования различных схем аппроксимации при численном решении определяющей системы уравнений. Важными представляются и конкретные рекомендации по выбору той или иной разностной схемы или параметров в ней, которые являются неотъемлемой частью технологии проведения вычислительного эксперимента при решении подобных комплексных проблем. Расчеты проводятся в программном пакете с открытым исходным кодом OpenFOAM.

В статье Грачева В. А. и Найштута Ю. С. о задаче устойчивости тонких упругих оболочек рассматривается проблема строгого математического определения для явления потери устойчивости тонкой упругой оболочки при внешних нагрузках. Показано, что существующая теория стационарных деформаций дает плохое совпадение с экспериментом. Предлагается использовать динамические уравнения, которые описывают накопление деформации после приложения нагрузки с течением времени. Показано, что такие уравнения допускают две формы решения, соответствующие разным волнам деформации по оболочке. Высказывается предположение, что именно это явление и порождает потерю устойчивости с ростом нагрузки. Предлагается практическое решение проблемы, которое заключается в акустическом мониторинге напряженной оболочки с выделением и измерением амплитуд опасных частот. Работа содержит несколько примеров расчета для напряженной цилиндрической оболочки. Показаны геометрические формы соответствующих волн деформации.

В статье Кожанова Д. А. и Любимова А. К. о моделировании гибких тканых композитов в системе ANSYS Mechanical APDL рассмотрены вопросы импорта в систему ANSYS Mechanical APDL модели поведения гибких тканых композиционных материалов с армирующей тканью полотняного переплетения при статическом растяжении вдоль нитей армирования. Механическая модель разработана авторами ранее и представляет собой аналитические соотношения для описания поведения композита при деформировании; модель учитывает изменения геометрической структуры, происходящие в армирующем слое материала в процессе деформирования, образование необратимых деформаций и взаимодействие накрест лежащих нитей армирующей ткани. Авторами разработан и представлен в статье модуль интеграции

для ANSYS, позволяющий пользователю задать параметры композита в терминах предметной области. В работе авторами представлены результаты применения модели для задачи одноосного растяжения образца ткани вдоль нитей основы. Для верификации предложенной модели и ее программной реализации для системы ANSYS авторами выполнены натурные экспериментальные исследования и численное моделирование растяжения образцов из гибких тканых композитов.

Статья Абделхафиза М. А. и Цибулина В. Г. о моделировании анизотропной конвекции теплопроводной жидкости, насыщающей пористую среду, посвящена исследованию устойчивости механического равновесия несжимаемой жидкости с примесью и насыщающей пористый массив высокой теплопроводности. Система подогревается снизу таким образом, что градиент температуры совпадает с направлением силы тяжести. При определенных условиях математическая задача допускает косимметрию — особое свойство уравнений, заключающееся в существовании внутренней скрытой связи. Косимметрия приводит к появлению однопараметрических семейств стационарных решений с непрерывно меняющимися вдоль семейства свойствами, что отличает ее от действия непрерывной группы симметрии. Задачи с косимметрией являются традиционной темой исследований для ростовских математиков, начиная с пионерской работы В. И. Юдовича (1991). Данная статья является продолжением этой серии работ. В работе предлагается аналитический метод определения порога возникновения конвекции в случае одновременного действия тепловых и концентрационных эффектов для систем, сохраняющих косимметрию. Для систем, которые имеют отклонение от косимметричности, предложен численный метод определения порога наступления конвекции.

В статье Старостина И. Е. и Быкова В. И. о проблеме программной реализации потенциально-потокowego метода описания физико-химических процессов рассматривается идея создания универсальной программной среды для моделирования физико-химических процессов средствами неравновесной динамики. Авторы предлагают общий вид разложения моделируемого процесса на подпроцессы и описывают структуру необходимых исходных данных. Указаны также некоторые стандартные программы, которые позволяют эксплуатировать создаваемую базу данных в модели процесса. Статья представляет в первую очередь методологический интерес в области моделирования физико-химических процессов.

Статья Белотелова Н. В., Коноваленко И. А., Назаровой В. М. и Зайцева В. А. о некоторых особенностях групповой динамики в агентной модели «ресурс–потребитель» посвящена традиционной и интересной теме — моделированию популяционной динамики видов, связанных одним из основных экологических взаимодействий: «ресурс–потребитель». В статье авторами предлагается модель, относящаяся к моделям типа «искусственная жизнь». В ней исследуются особенности групповой динамики особей-агентов в компьютерной модели, которая была реализована в среде MatLab и позволяла изменять все параметры, включая размеры участка и начальное пространственно-временное распределение особей по ареалу. В статье приведено описание большого количества вычислительных экспериментов и проанализированы полученные результаты.

В статье Аристова В. В. и Ильина О. В. о методах и задачах кинетического подхода для моделирования биологических структур рассматривается моделирование биологических систем в форме неравновесных термодинамических или статистико-кинетических процессов. Из некоторых содержательных гипотез и экспериментальных данных выводится дифференциальное уравнение дрейфа системы к химическому и термическому равновесию после возникновения неравновесного состояния в некоторый момент времени. Устанавливается теоретическая связь между размерами организма и параметрами кинетической динамики. В работе моделируется процесс старения как медленный переход организма к стационарному равновесному статистико-физическому состоянию. При этом вводятся две постоянные времени: одна — для поддержания метаболизма, а другая (существенно большая) — для процесса старения. В заключение обсуждаются возможности кинетического подхода, а также проблемы и перспективы в данной предметной области.

Орлов М. А., Камзолова С. Г., Рясик А. А., Зыкова Е. А. и Сорокин А. А. в своей статье о профилях вызванной суперспирализацией дестабилизации дуплекса ДНК (SIDD) для промоторов бактериофага T7 рассматривают свойства, имеющие решающее значение для функционирования регуляторных областей ДНК. Оказывается, что физико-химические и структурные свойства обеспечивают кодирование ДНК-белковых взаимодействий, лежащих в основе различных процессов регуляции. Одним из таких свойств является характеристика SIDD (Stress-Induced Duplex Destabilization), описывающая склонность участка дуплекса ДНК к плавлению при заданном уровне суперспирализации. В данной работе модель SIDD использована для получения профилей вероятности плавления последовательностей промоторов бактериофага T7, а также установлено, что принадлежащие к разным классам, т. е. активные в различных стадиях жизненного цикла, промоторы бактериофага T7 имеют значительно различающиеся профили вероятности плавления при очень близкой (в ряде случаев — идентичной) первичной структуре.

Красняков И. В., Брацун Д. А. и Письмен Л. М. в своей статье о математическом моделировании роста карциномы при динамическом изменении фенотипа клеток рассматривают двумерную хемомеханическую модель роста инвазивной карциномы в ткани эпителия. Данная статья является естественным продолжением ряда работ авторов, часть из которых опубликована в нашем журнале в № 2 за 2013 год и в № 4 за 2014 год. В работе предложена математическая модель как эпителиальной ткани, так и модель роста гетерогенной опухоли. В результате численного моделирования получены и проанализированы несколько разных типов инвазии динамика эволюции опухоли.

В статье Силаевой В. А., Силаевой М. В. и Силаева А. М. об оценивании параметров моделей временных рядов с марковскими переключениями режимов рассматривается регрессионная задача с марковскими переключениями режимов. Авторы предлагают новый метод оценки времени переключения режимов. Метод заключается в использовании максимума апостериорной вероятности оценки процесса переключений в качестве критерия при принятии решений. Сравнивая предложенный метод с оценками, сделанными в эконометрическом пакете EViews, авторы фиксируют сравнимое качество результатов при упрощении вычислительной процедуры. Сравнительный анализ алгоритмов проведен на тестовых модельных примерах и на финансовых данных — индексе РТС, S&P 500 и акциях «Газпрома» за период 2013–2018 гг.

В статье Хавинсона М. Ю. и Колобова А. Н. о моделировании динамики численности занятого населения в отраслях экономики (агент-ориентированный подход) рассмотрены колебания численности занятых по видам экономической деятельности на примере Еврейской автономной области. Исходя из анализа соответствующей литературы, была выдвинута гипотеза о том, что агент на рынке труда руководствуется стратегией, характерной для его возрастной группы. Для проверки гипотезы была построена агентная модель, рассматривающая трехотраслевую социально-экономическую систему. В статье приведено описание результатов численного моделирования для разных стратегий поведения агентов. Разработанная модель потенциально может быть использована как на практике, так и в учебном процессе в рамках курсов по моделированию социально-экономических процессов, имитационному моделированию, исследованию операций и др.

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

*С уважением от имени редакции,  
Н. Митин*