

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

Статья Тюрина А. И. о прямо-двойственном быстром градиентном методе с моделью посвящена построению градиентных методов для решения задач выпуклых минимизаций. Работа во многом является естественным продолжением работы Гасникова А. В. и автора, опубликованной в прошлом году в седьмом номере «Журнала вычислительной математики и математической физики». Использование концепции (δ, L) -модели и адаптивной структуры методов позволило автору предложить подход, включающий в себя различные методы, использовавшиеся для разных конкретных классов задач.

В статье Маглеванного И. И. и Карякиной Т. И. о численном решении нелинейных интегральных уравнений второго рода типа Урысона методом последовательных квадратур с использованием погруженной схемы Дормана–Принса предлагается итерационный алгоритм численного решения нелинейных интегральных уравнений Фредгольма и Вольтерры второго рода типа Урысона. В работе исследуется и реализуется некоторая вариация метода последовательных приближений, используемая для решения интегральных уравнений. В качестве приложения к статье предоставлен программный код на языке C++.

В статье Стонякина Ф. С., Степанова А. Н., Гасникова А. В. и Титова А. А. о методе зеркального спуска для условных задач оптимизации с большими значениями норм субградиентов функциональных ограничений рассматривается задача выпуклой или квазивыпуклой негладкой оптимизации на множестве, заданном выпуклым или квазивыпуклым негладким неположительным липшицевым ограничением. В статье предложены три новых алгоритма типа зеркального спуска, отличающихся условием продуктивного шага — учитывающих норму градиента и/или вектора из субградиента, а также использующих процедуру рестарта. Все это стандартная технология, однако в предложенном авторами варианте она значительно расширяет область применимости классического оптимизационного подхода зеркального спуска, в частности, на важную проблему липшицевой и гелдеровской аппроксимации точек высокой и очень высокой размерности с функциональными ограничениями (обобщение проблемы Ферма–Торричелли–Штейнера).

В статье Конюхова В. М., Конюхова И. В. и Чекалина А. Н. о численном моделировании и параллельных расчетах тепломассопереноса при физико-химических воздействиях на неоднородный нефтяной резервуар, разрабатываемый системой скважин, рассмотрены математические и численные модели взаимосвязанных термо- и гидродинамических процессов в рабочем режиме разработки единого нефтескважинного комплекса при гидрогелевом затоплении неоднородного нефтяного пласта. Особенностью предложенного подхода является моделирование работы специального наземного оборудования, предназначенного для регулирования режимов работы как всего комплекса, так и его отдельных элементов. Математическая модель включает уравнения, описывающие нестационарную двухфазную пятикомпонентную фильтрацию в пласте, квазистационарный тепломассоперенос в скважинах и рабочих каналах насосов. Задача решается численно, с использованием консервативных разностных схем, построенных на основе метода конечных разностей, и итерационных алгоритмов, ориентированных на технологии параллельных вычислений.

Статья Маловичко М. С. и Петрова И. Б. о численном решении совместных обратных задач геофизики с использованием требования структурного подобия посвящена проблеме обработки геофизических данных, полученных в результате исследований несколькими разными

способами, например сейморазведкой и электрической разведкой. Рассматриваются методы решения подобных задач, приведен обзор таких методов. Приводятся описание реализованного авторами алгоритма и пример расчетов с его использованием.

В статье Блантер Е. М., Елаевой М. С. и Шнирман М. Г. о синхронизации и несимметрии в модели Курамото из трех неидентичных осцилляторов (особенности моделирования меридионального потока Солнца) рассматривается математическая модель синхронизации, исследуется решение обратной задачи, а полученные результаты применяются к восстановлению свойств меридионального потока Солнца и интерпретации данных гелиосейсмологии. Указанная модель описывает движение солнечного вещества в приповерхностных слоях. Ограниченная возможность осуществить непосредственные наблюдения делает очень важным построение физически правдоподобных и математически корректных моделей солнечной активности. Получение результатов в замкнутом и простом для анализа виде делает результаты работы особенно интересными.

Статья Королева С. А. и Майкова Д. В. о решении задачи оптимального управления процессом метаногенеза на основе принципа максимума Понтрягина рассматривает математическую модель, описывающую процесс получения биогаза из отходов животноводства. В работе сначала проводится идентификация параметров модели на основе экспериментальных данных с использованием генетических алгоритмов, а потом решается задача оптимизации функционирования биогазовой установки с точки зрения выхода биогаза. Задача оптимального управления рассматривалась в форме Лагранжа и численно решалась на основе принципа максимума Понтрягина.

В статье Лобачевой Л. В. и Борисовой Е. В. о моделировании процессов миграции загрязнений от свалки твердых бытовых отходов представлены результаты исследования процессов миграции загрязнений в водоохранной зоне озера Селигер. Для изучения особенностей распространения загрязняющих веществ и определения миграционных параметров проведен комплекс полевых и лабораторных исследований в районе расположения свалки. Модель представляет собой систему линейных уравнений типа «реакция–диффузия», которая отдельно решается для распространения загрязнений по горизонтали и вертикали. Представлена имитационная модель, которая оценивает долговременную — 100-летнюю динамику — и дает прогноз загрязнений в существующем режиме функционирования свалки.

В статье Попова В. С. и Поповой А. А. о моделировании взаимодействия стенки канала с упругозакрепленным торцевым уплотнением рассматривается моделирование гидроупругого взаимодействия торцевого уплотнения с вибрирующей стенкой канала, заполненного вязкой жидкостью. Авторами показано, что на колебания торцевого уплотнения влияют его взаимодействие с жидкостью на торце, взаимодействие жидкости в канале с вибрирующей продольной стенкой, а также вязкость и инерция движения жидкости. Данная особенность оценена посредством определенных в работе коэффициентов демпфирования и присоединенных масс, вошедших в полученное уравнение движения торцевого уплотнения. Для установившихся гармонических колебаний определены амплитудно-частотные характеристики торцевого уплотнения для случаев ползучего течения и течения с учетом сил инерции жидкости и проведены их расчеты.

Статья Киселева М. В. об исследовании двухнейронных ячеек памяти в импульсных нейронных сетях посвящена актуальному вопросу нейронауки — механизмам, лежащим в основе рабочей памяти. В работе решается задача по поиску элементарных нейронных микроцепей, способных в условиях работы в большой нейронной сети сохранять память о предыдущем воздействии в виде специфической активности. Большая часть работы посвящена вопросам оптимизации параметров сети с целью повышения точности классификации такой активности (определение стимула по остаточной нейронной активности). На основании проделанного анализа делается вывод, что элементарной структурой хранения информации является пара нейронов, связанных двунаправленной связью.

Статья Степаняна И. В. о биоматематической системе методов исследования строения нуклеиновых кислот посвящена применению различных методов математического анализа, по-

иска паттернов и изучения состава нуклеотидов в последовательностях ДНК на геномном уровне. Работа базируется на идеологии алгебры гиперкомплексных чисел, которая исходно позволяет оперировать расширенными базисными наборами независимых переменных (векторов) для углубленного, детального математического описания наблюдаемых свойств любых систем, в том числе и молекулярных. Если для физических задач успешное применение представлений о кватернионах и бикватернионах уже хорошо известно, то для биологических проблем применение этой техники — редкое явление. Автором на основе использования элементов данного подхода представлено несколько разновидностей разработанных матричных методов и проиллюстрировано их применение для решения ряда нетривиальных задач в структуре генетических текстов известных геномов. Указаны перспективы развиваемых схем в дальнейшем совершенствовании методов сравнительной геномики и модернизации программного обеспечения биоинформационных баз данных, а также в применении к другим аспектам компьютерной биологии.

Статья Коваленко И. Б., Древаль В. С., Федорова В. А., Холиной Е. Г. и Гудимчука Н. Б. об описании изгибов протофиламентов микротрубочек посвящена анализу взаимного расположения соседних мономеров тубулина в протофиламентах микротрубочек по данным из Protein Data Bank. Для анализа используются три различных подхода. Предпочтение авторов отдается одному из этих подходов, в котором с каждым мономером связывается декартова система координат, и расположение мономеров относительно друг друга характеризуется тремя углами Эйлера взаимного расположения этих систем координат. Этот подход успешно применялся авторами статьи для анализа изменений ориентации мономеров в димерах и тетрамерах тубулина при разных условиях в ходе их полноатомной молекулярной динамики. Авторы сравнивают полученные значения углов с экспериментальными данными и делают вывод о том, что их метрики достаточно хорошо описывают геометрию микротрубочки и могут быть использованы в дальнейшем исследователями.

Статья Четырбоцкого В. А. и Четырбоцкого А. Н. о задачах численного моделирования динамики системы «почва–растение» посвящена развитию модели для описания динамики поступления питательных веществ в растения в зависимости от баланса органических веществ в почве, динамики почвенных организмов и удобрений. Математическая модель состоит фактически из нескольких компонентов: модель динамики элементов питания растений, модель динамики микроорганизмов, модель динамики биомассы растений и органики и описание внешней среды, т. е. воздействие внешней среды на динамические переменные системы. В работе в том числе разобран упрощенный частный случай, в котором получены качественные аналитические оценки. В результате численного исследования полной модели получены характеристики эволюции параметров многокомпонентного динамического объекта «почва–растение».

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

*С уважением от имени редакции,
Н. Митин*