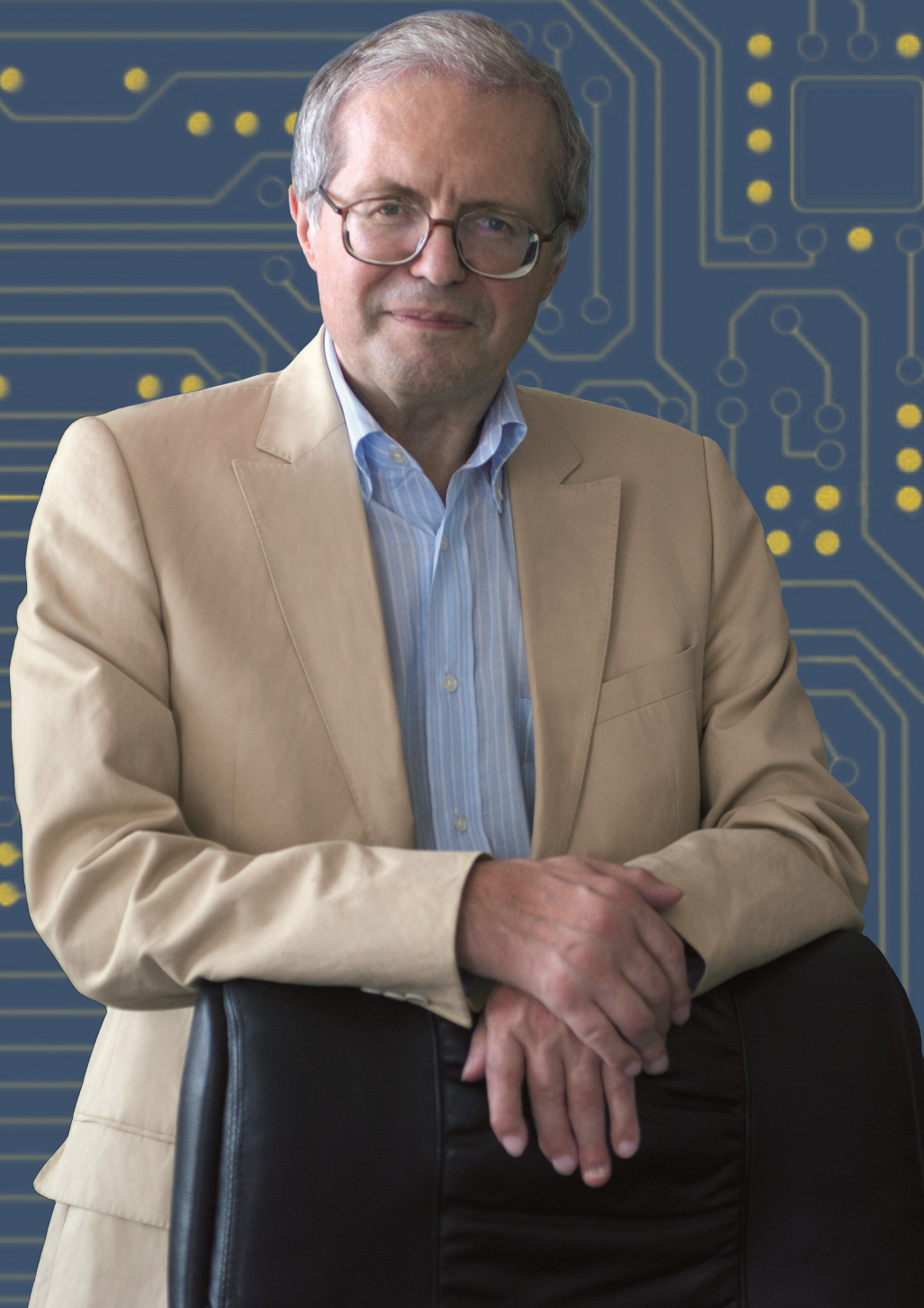


ISSN 2712-9942

АКАДЕМИК
В. Б. БЕТЕВАНН



УСПЕХИ КИБЕРНЕТИКИ

RUSSIAN JOURNAL OF CYBERNETICS

2021
T.2 No 2

**ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
«ФЕДЕРАЛЬНЫЙ НАУЧНЫЙ ЦЕНТР
НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ИНСТИТУТ СИСТЕМНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК»**

Успехи кибернетики

Russian Journal of Cybernetics

Том 2

№ 2

Vol. 2

No. 2

Москва

2021

Учредитель и издатель

Федеральное государственное учреждение «Федеральный научный центр
Научно-исследовательский институт системных исследований Российской академии наук»
(ФГУ ФНЦ НИИСИ РАН)

«Успехи кибернетики» — это рецензируемый научный журнал, в котором публикуются научные статьи по следующим специальностям (физико-математические, технические науки):

- 1.2.2. Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ;
- 2.2.2. Электронная компонентная база микро- и наноэлектроники, квантовых устройств;
- 2.3.1. Системный анализ, управление и обработка информации.

Миссия журнала — развитие научных направлений по заявленной тематике в России и за рубежом, соответствующих приоритетным направлениям развития науки, технологий и техники в Российской Федерации, а также перечню критических технологий РФ.

Журнал ориентирован на пропаганду передовых идей в области физики, математики, технических наук, участие в реализации задач, сформулированных Президентом РФ в Указе от 01.12.2016 № 642, по научно-технологическому развитию РФ, а также импортозамещению по приоритетным направлениям стратегического развития страны, соответствующим тематике журнала, обеспечение печатными площадями высококвалифицированных кадров, повышение качества диссертационных исследований в данных отраслях путем развития механизма профессионального и общественного обсуждения их научных результатов, воспитание молодого поколения ученых.

Журнал принимает к публикации оригинальные статьи; переводы статей, опубликованных в зарубежных журналах (при согласии правообладателя на перевод и публикацию); обзоры; эссе; комментарии; другие информационные материалы.

Издание будет полезно ученым, работающим в соответствующих областях наук, а также аспирантам и студентам.

Главный редактор

Бетелин Владимир Борисович, академик РАН, д. ф.-м. н., профессор, научный руководитель, ФГУ ФНЦ НИИСИ РАН, Москва

Заместитель главного редактора

Галкин Валерий Алексеевич, д. ф.-м. н., профессор, директор, Сургутский филиал ФГУ ФНЦ НИИСИ РАН, Сургут

Члены редакционной коллегии

Власов Сергей Евгеньевич, д. т. н., директор, ФГУ ФНЦ НИИСИ РАН, Москва

Панченко Владислав Яковлевич, академик РАН, д. ф.-м. н., профессор, председатель Совета, Российский фонд фундаментальных исследований; заведующий кафедрой медицинской физики, Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, Москва

Савин Геннадий Иванович, академик РАН, д. ф.-м. н., профессор, научный руководитель, Межведомственный суперкомпьютерный центр РАН — филиал ФГУ ФНЦ НИИСИ РАН, Москва

Соифер Виктор Александрович, академик РАН, д. т. н., профессор, президент, главный научный сотрудник научно-исследовательской лаборатории автоматизированных систем научных исследований, Самарский национальный исследовательский университет им. ак. С. П. Королева, Институт систем обработки изображений РАН, Самара

Чубариков Владимир Николаевич, д. ф.-м. н., профессор, заведующий кафедрой математических и компьютерных методов анализа, Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, Москва

Чаплыгин Юрий Александрович, академик РАН, д. т. н., профессор, президент, Московский институт электронной техники, Москва

Петров Игорь Борисович, член-корреспондент РАН, д. ф.-м. н., профессор, заведующий кафедрой информатики, Московский физико-технический институт, Москва

Смирнов Николай Николаевич, д. ф.-м. н., профессор, заместитель декана механико-математического факультета, Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, заместитель директора по стратегическим информационным технологиям, ФГУ ФНЦ НИИСИ РАН, Москва

Тишкин Владимир Федорович, член-корреспондент РАН, д. ф.-м. н., профессор, профессор кафедры вычислительных методов, Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, Москва

Губайдуллин Амир Анварович, д. ф.-м. н., профессор, директор, Тюменский филиал Института теоретической и прикладной механики им. С. А. Христиановича Сибирского отделения РАН, Тюмень

Яковлевский Михаил Владимирович, член-корреспондент РАН, д. ф.-м. н., профессор, заместитель директора по научной работе, Институт прикладной математики им. М. В. Келдыша РАН, Москва

Шагалиев Рашид Мирзагалиевич, д. ф.-м. н.

Старков Сергей Олегович, д. ф.-м. н., профессор, начальник отделения интеллектуальных кибернетических систем, Обнинский институт атомной энергетики, Обнинск

Еськов Валерий Матвеевич, д. ф.-м. н., д. б. н., профессор, заведующий отделом, Сургутский филиал ФГУ ФНЦ НИИСИ РАН, Сургут

Лаврентьев Михаил Михайлович, д. ф.-м. н., профессор, заместитель директора по научной работе, Институт автоматизации и электрометрии Сибирского отделения РАН, Новосибирск

Пятков Сергей Григорьевич, д. ф.-м. н., профессор, заведующий кафедрой высшей математики, Югорский государственный университет, Ханты-Мансийск

Ильин Валерий Павлович, д. ф.-м. н., профессор, профессор кафедры прикладной математики, Новосибирский государственный технический университет, Новосибирск

Крыжановский Борис Владимирович, член-корреспондент РАН, д. ф.-м. н., руководитель, Центр оптико-нейронных технологий ФГУ ФНЦ НИИСИ РАН, Москва

Нагорнов Олег Викторович, д. ф.-м. н., профессор, первый проректор, Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва

Савченко Владимир Васильевич, PhD (Theoretical Mechanics), Университет Хосэй, Токно, Япония

Земто Ясунари, PhD (Physics), Университет Хосэй, Токно, Япония

Пападопулос Атанас, Doctorat d'Etat (Habilitation), mathematics, Университет Страсбурга, Национальный центр научных исследований Франции, Страсбург, Франция

Ответственный секретарь

Гавриленко Тарас Владимирович, к. т. н.

Ответственный редактор

Чалова Анна Петровна, к. филол. н.

Технический редактор

Моргун Дмитрий Алексеевич, к. ф.-м. н., доцент

Редакторы

Егоров Александр Алексеевич, к. т. н.

Камилов Эркин Махмуджанович

Переводчик

Троицкий Дмитрий Игоревич, к. т. н., доцент

Фото на обложке

Бетелин Владимир Борисович, академик РАН, д. ф.-м. н., профессор, научный руководитель ФГУ ФНЦ НИИСИ РАН

Журнал зарегистрирован Федеральной службой по надзору в сфере связи, информационных технологий и массовых коммуникаций.
Свидетельство о регистрации средства массовой информации ЭЛ № ФС 77-78857 от 04.08.2020.

Издается с 2020 года. Выпускается 4 раза в год.

Адрес редакции:

ФГУ ФНЦ НИИСИ РАН, 117218, г. Москва, Нахимовский просп., дом 36, корпус 1.

Телефон: +7 9226-54-57-88, факс: +7 (495) 719-76-81, e-mail: taras.gavrilenko@gmail.com. Сайт: jcyb.ru.

Founder and Publisher

Federal State Institution

Scientific Research Institute for System Analysis of the Russian Academy of Sciences (SRISA)

Russian Journal of Cybernetics is peer-reviewed.

The journal publishes papers on physics, mathematics, and engineering. The key areas of interest are:

- simulation, numerical methods, and simulation software
- electronic components for micro- and nanoelectronics, and quantum devices
- system analysis, control, and information processing.

Our mission is advancing these research areas in Russia and globally, supporting the national priority fields of research and development, and the critical technologies.

The Journal promotes advanced concepts in physics, mathematics, engineering, and facilitates the national research and technology development under the Russian President Decree No. 642 dated 01.12.2016, and phasing out strategic imports. We offer an opportunity for professional researchers to publish. We improve the doctorate research quality through public peer review and educate the new generation of researchers.

The Journal accepts original papers; translations of papers from international journals (consent of the right holders for the translation and publication is required); reviews; essays; remarks, and event reports.

The Journal is intended for researchers, university, and doctorate students.

Chief Editor

Prof. *Vladimir B. Betelin*, member of the Russian Academy of Sciences (RAS),
Doctor of Science (Phys&Math), Academic Director, SRISA, Moscow

Vice Chief Editor

Prof. *Valery A. Galkin*, Doctor of Science (Phys&Math), Director, SRISA, Surgut Branch, Surgut

Editorial Board

Prof. *Sergey E. Vlasov*, Doctor of Science (Engineering), Director, SRISA, Moscow

Prof. *Vladislav Ya. Panchenko*, member of the Russian Academy of Sciences (RAS), Doctor of Science (Phys&Math), Chairman of the Council, Russian Foundation for Basic Research, Chairperson of the Department of Medical Physics, Lomonosov Moscow State University, Moscow

Prof. *Gennady I. Savin*, member of the Russian Academy of Sciences (RAS), Doctor of Science (Phys&Math),

Academic Director, Joint Supercomputer Center of the Russian Academy of Sciences, SRISA subdivision, Moscow

Prof. *Viktor A. Soifer*, member of the Russian Academy of Sciences (RAS), Doctor of Science (Engineering), President, Chief Researcher Lab for Automated Research Systems, Korolev Samara National Research University, Academic Director, Institute of Image Processing Systems, RAS, Samara

Prof. *Vladimir N. Chubarikov*, Doctor of Science (Phys&Math), Chairperson, Department of Mathematical and Computer Analysis Methods, Lomonosov Moscow State University, Moscow

Prof. *Yuri A. Chaplygin*, member of the Russian Academy of Sciences (RAS), Doctor of Science (Engineering), President, National Research University of Electronic Technology, Moscow

Prof. *Igor B. Petrov*, corresponding member of the Russian Academy of Sciences (RAS), Doctor of Science (Phys&Math), Chairperson, Department of Informatics,
Moscow Institute of Physics and Technology, Moscow

Prof. *Nikolay N. Smirnov*, Doctor of Science (Phys&Math), Deputy Dean, Faculty of Mechanics and Mathematics, Lomonosov Moscow State University, Deputy Director for Strategic Information Technology, SRISA, Moscow

Prof. *Vladimir F. Tishkin*, corresponding member of the Russian Academy of Sciences (RAS), Doctor of Science (Phys&Math), Professor, Department of Computational Methods, Lomonosov Moscow State University, Moscow

Prof. *Amir A. Gubaidullin*, Doctor of Science (Phys&Math), Director, Tyumen Division, Khristianovich Institute of Theoretical and Applied Mechanics, RAS Siberian Branch, Tyumen

Prof. *Mikhail V. Iakovovski*, corresponding member of the Russian Academy of Sciences (RAS), Doctor of Science (Phys&Math), Deputy Director for Research, Keldysh Institute of Applied Mathematics, RAS, Moscow

Prof. *Rashit M. Shagaliyev*, Doctor of Science (Phys&Math)

Prof. *Sergey O. Starkov*, Doctor of Science (Phys&Math), Head, Division of Intelligent Cybernetic Systems, Obninsk Institute of Atomic Energy, Obninsk

Prof. *Valery M. Eskov*, Doctor of Science (Phys&Math), Doctor of Science (Biology), Head of Division, SRISA, Surgut Division, Surgut

Prof. *Mikhail M. Lavrentiev*, Doctor of Science (Phys&Math), Deputy Director for Research, Institute of Automation and Electrometry, RAS Siberian Branch, Novosibirsk

Prof. *Sergey G. Pyatkov*, Doctor of Science (Phys&Math), Chairperson, Department of Further Mathematics, Yugra State University, Khanty-Mansiysk

Prof. *Valerii P. Ilyin*, Doctor of Science (Phys&Math), Professor, Department of Applied Mathematics, Novosibirsk State Technical University, Novosibirsk

Prof. *Boris V. Kryzhanovskii*, corresponding member of the Russian Academy of Sciences (RAS), Doctor of Science (Phys&Math), Director, Opto-neural Technologies Center, Scientific Research Institute for System Analysis, Russian Academy of Sciences (SRISA), Moscow

Prof. *Oleg V. Nagornov*, Doctor of Science (Phys&Math), First Vice-Rector, National Research Nuclear University MEPhI, Moscow

Prof. *Vladimir V. Savchenko*, PhD (Theoretical Mechanics), Hosei University, Tokyo, Japan

Prof. *Yasunari Zempo*, PhD (Physics), Hosei University, Tokyo, Japan

Prof. *Athanase Papadopoulos*, Doctorat d'Etat (Habilitation), Mathematics, University of Strasbourg, French National Centre for Scientific Research, Strasbourg, France

Executive Editor

Taras V. Gavrilenko, Ph.D. (Engineering)

Managing Editor

Anna P. Chalova, Ph.D. (Linguistics)

Technical Editor

Dmitry A. Morgun, Ph.D. (Phys&Math), Assoc. Prof.

Editors

Alexander A. Egorov, Ph.D. (Engineering)

Erkin M. Kamilov

Translator

Dmitry I. Troitsky, Ph.D. (Engineering), Assoc. Prof.

Cover Image

Prof. Vladimir B. Betelin, member of the Russian Academy of Sciences (RAS), Doctor of Science (Phys&Math), Academic Director, SRISA

The journal is registered with the Federal Service for Supervision of Communications, Information Technology and Mass Media.
Mass media registration certificate EL No. FS 77-778857 dated on 04.08.2020.

Published since 2020. 4 issues per year.

Editorial Board Address:

SRISA, Russia 117218, Moscow, Nakhimovsky pr., 36/1.

Tel.: +7(922)654-5788, fax: +7(495)719-76-81, e-mail: taras.gavrilenko@gmail.com. Web: jcyb.ru.

СОДЕРЖАНИЕ

С. Е. Власов	
75 лет Бетелину Владимиру Борисовичу	6
Решение Международной конференции, приуроченной к 200-летию со дня рождения великого русского математика академика П. Л. Чебышёва «Математические идеи П. Л. Чебышёва и их приложения к современным проблемам естествознания»	9
В. Б. Бетелин, В. А. Галкин, А. В. Ряховский	
Точечные и распределенные модели распространения коронавирусной инфекции	12
А. С. Ахманов, В. И. Соколов, В. Я. Панченко	
Высокоскоростные оптические шины передачи данных на печатных платах для микропроцессорных вычислительных систем	21
Н. Н. Смирнов, В. В. Тюренкова, Л. И. Стамов, Дж. Хадем	
Вычислительное моделирование течений полидисперсных газокапельных смесей с химическим превращениями	29
А. Пападопулос	
Про Эйлера и Чебышёва, основателей российской математики	42
Я. Земпо, С. С. Кано	
Применение метода максимальной энтропии к временным рядам, получаемым в реальном времени в рамках нестационарной теории функционала плотности	64
И. Б. Петров	
Математическое моделирование динамических процессов в деформируемой среде с применением сеточно-характеристического метода	74
А. А. Губайдуллин, О. Ю. Болдырева, Д. Н. Дудко	
Об упругих свойствах пористых сред с газовыми гидратами	82
М. М. Лаврентьев, М. Ю. Шадрин, И. Г. Таранцев	
Опыт совместной разработки сложных программно-аппаратных систем обработки больших потоков данных	90

CONTENTS

S. E. Vlasov	
75 th Anniversary of Vladimir B. Betelin	6
Declaration of the P. Chebyshev Mathematical Ideas and Their Applications to Natural Sciences International Conference	9
V. B. Betelin, V. A. Galkin, A. V. Ryakhovskiy	
Local and Distributed Models of the Coronavirus Spread	12
A. S. Akhmanov, V. I. Sokolov, V. Ya. Panchenko	
CPB High-Speed Optical Data Buses for Microprocessor Systems	21
N. N. Smirnov, V. V. Tyurenkova, L. I. Stamov, J. Khadem	
Simulation of Polydisperse Gas-Droplet Mixture Flows with Chemical Transformations	29
Athanase Papadopoulos	
On Euler and Chebyshev, at the Foundation of Russian Mathematics	42
Y. Zempo, S. S. Kano	
Maximum Entropy Method for Time-Series Data Obtained from Real-Time Evolution of Time Dependent Density Functional Theory	64
I. B. Petrov	
Simulation of Dynamic Processes in Deformable Medium with the Grid-Characteristic Approach . . .	74
A. A. Gubaidullin, O. Yu. Boldyreva, D. N. Dudko	
Elastic Properties of Porous Media Containing Gas Hydrates	82
M. M. Lavrentiev, M. Y. Shadrin, I. G. Tarancev	
Collaborative Development of Complex Software and Hardware Systems for High Data Rate Processing	90

75 ЛЕТ



Бетелину Владимиру Борисовичу

8 августа 2021 года исполняется 75 лет академику РАН, одному из основателей и научному руководителю Федерального научного центра Научно-исследовательского института системных исследований Российской академии наук Владимиру Борисовичу Бетелину, директором которого он являлся с 1989 по 2015 годы.

В. Б. Бетелин родился 8 августа 1946 г. в г. Кинешме Ивановской обл. В 1970 г. окончил Механико-математический факультет Московского государственного университета им. М. В. Ломоносова. В 1981 г. защитил кандидатскую диссертацию, в 1986 г. — докторскую. В 1991 г. ему было присвоено звание профессора. В 1997 г. избран членом-корреспондентом РАН по Отделению информатики, вычислительной техники и автоматизации РАН (специальность «Автоматизация программирования»), а в 2003 г. — действительным членом РАН по Отделению информационных технологий и вычислительных систем РАН (специальность «Информационные технологии и автоматизация»).

Владимир Борисович Бетелин — широко известный специалист в области информационных технологий и систем автоматизации, внес большой вклад в развитие теории и практики разработки инструментальных систем программного обеспечения, систем интерактивной машинной графики и геометрического моделирования, а также программных систем машиностроительных САПР.

В. Б. Бетелин в течение многих лет преподавал на механико-математическом факультете МГУ. Он является автором целого ряда методических пособий для студентов. В 1971–1986 гг. на механико-

математическом факультете МГУ и в ИПМ АН СССР (1975–1979 гг.) занимался проблемами создания отладочных компиляторов с языка высокого уровня и на этой основе — эффективных компиляторов с языка ФОРТРАН с расширенной диагностикой для вузовских вычислительных центров. Разработанные под его руководством и при его непосредственном участии системы пакетной обработки АСФОР и диалоговая многотерминальная система ЭКСПРЕСС для ЕС ЭВМ эксплуатировались в МГУ, МИСИС, МГПИ и в ряде других вузов страны. Результаты этих работ составили основу диссертации на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук.

Также в этот период под его руководством и при его непосредственном участии на механико-математическом факультете разрабатывается специальное программное обеспечение практикумов по программированию и другим математическим дисциплинам, дающее студенту возможность диалогового взаимодействия с ЭВМ в терминах объектов изучаемой дисциплины при относительно низких затратах на выполнение рутинных работ. Система диалогового доступа к учебным пакетам прикладных программ по алгебре, дифференциальным уравнениям, математической статистике и т.д. для СМ ЭВМ эксплуатировалась в МГУ, МГПИ, МЭИ, МФТИ и ряде других вузов страны.

В 1979–1991 гг. занимался проблемами создания аппаратно-программных систем автоматизации проектирования в машиностроении в рамках совместных работ МГУ и АН СССР с ПО ЗИЛ. Именно в те годы В. Б. Бетелин разработал методологию и технологию создания программно-аппаратных комплексов машиностроительных систем автоматизированного проектирования, а также соответствующие средства автоматизации программирования. Был решен ряд оптимизационных задач, убедительно показавших, что без ущерба для прочности несущую раму кузова можно облегчить на 50 килограммов. В этот период под его руководством и при его непосредственном участии были разработаны основные программные системы геометрического моделирования двумерных и трехмерных объектов, поверхностей сложной формы, а также подсистемы интерактивной машинной графики для визуализации результатов моделирования. Результаты этих работ легли в основу диссертации на соискание ученой степени доктора физико-математических наук (1986 г.).

В этот же период под руководством В. Б. Бетелина совместно со специалистами ПО ЗИЛ ведутся работы по созданию первых отечественных рабочих станций на базе 32-разрядных микропроцессоров с операционной системой UNIX, а также мини-фабрики по производству этих станций, в первую очередь, для обеспечения конструкторско-технологических служб ПО ЗИЛ. В марте 1989 г. была выпущена установочная партия рабочих станций «БЕСТА-88», а к 1990 г. было произведено более тысячи таких систем с наработкой на отказ 10 000 час.

В настоящее время область научных интересов В. Б. Бетелина включает суперкомпьютерные технологии, архитектуру, элементную базу суперЭВМ. Основные результаты научной деятельности В. Б. Бетелина за последние 20 лет: отечественная информационно-безопасная аппаратно-программная платформа, отечественные субмикронные 32- и 64-разрядные микропроцессоры с RISC-архитектурой, отечественная операционная система реального времени, а также современные средства автоматизации разработки прикладных программ, отечественная технологическая линия по производству СБИС с субмикронными проектными нормами.

Период с 2007 по 2020 годы ознаменовался следующими результатами.

В. Б. Бетелиным была осуществлена разработка и организация серийного производства отечественных 32- и 64-разрядных микропроцессоров и коммуникационных СБИС, в том числе устойчивых к воздействиям факторов космического пространства, вычислительных систем специального назначения на их основе, в том числе высокопроизводительных систем терафлопсного класса. В этот период произведено и поставлено заказчикам более 300 тыс. отечественных микропроцессоров и СБИС, 75 тыс. электронных модулей и 15 тыс. ЭВМ на их основе.

В. Б. Бетелиным осуществлено научное руководство и непосредственное участие в реализации проекта «Развитие суперкомпьютерных и грид-технологий» в 2010–2012 гг. в интересах атомной энергетики, ракетно-космической, авиационной и автомобильной отраслей. Проект утвержден в 2009 г. Комиссией при Президенте РФ по вопросам модернизации и технологического развития экономики России в 2009–2012 гг.

Под руководством В. Б. Бетелина осуществлены разработка современного отечественного 64-разрядного микропроцессора двойного назначения с рабочей частотой функционирования 1 ГГц и создание на его основе семейства настольных и мобильных персональных компьютеров.

В 2014–2020 гг. В. Б. Бетелин осуществил, организовал и непрерывно координировал развитие и становление Федерального государственного учреждения «Федеральный научный центр Научно-исследовательский институт системных исследований Российской академии наук» (ФГУ ФНЦ НИИСИ РАН), миссия и стратегическая цель которого состоит в обеспечении ведущих отраслей экономики России (машиностроительная, атомная, авиакосмическая, нефтегазовая) перспективными образцами высоконадежной аппаратуры, ПО реального времени, технологий, гарантированно выполняющими критические функции и не уступающими лучшим зарубежным продуктам по технико-экономическим характеристикам. Результаты высоко оценены контролирующими организациями, по итогам реализации Программы развития ФГУ ФНЦ НИИСИ РАН на 2016–2020 гг. Федеральный научный центр подтвердил свою принадлежность к 1 (высшей) категории научных организаций.

С 1997 г. В. Б. Бетелин — директор Института микротехнологий РНЦ «Курчатовский институт», где к 2003–2004 гг. была запущена мини-фабрика — кластерная технологическая линия для изготовления микропроцессоров и сложных СБИС. В 2005 г. он стал вице-президентом Научного центра «Курчатовский институт». С 2010 г. В. Б. Бетелин — научный руководитель создания и применения суперкомпьютерных технологий в гражданских отраслях промышленности РФЯЦ-ВНИИЭФ.

В. Б. Бетелин — член бюро Отделения нанотехнологий и информационных технологий Российской академии наук, сопредседатель Совета РАН по координации научных исследований по направлению «Стратегические информационные технологии, включая вопросы создания суперкомпьютеров и разработки программного обеспечения», член Научно-координационного совета членов РАН — научных руководителей научных организаций, подведомственных Минобрнауки России и находящихся под научно-методическим руководством РАН, член Научно-координационного совета РАН по проблемам прогнозирования и стратегического планирования в Российской Федерации, председатель Экспертной комиссии по премии имени С. А. Лебедева РАН, член Экспертной комиссии Министерства науки и высшего образования РФ по направлению «Информационно-телекоммуникационные системы и технологии», член редколлегии журнала «Фундаментальная и прикладная математика», член редакционного совета журнала «Информационные технологии и вычислительные системы» РАН, член редколлегии журнала «Вопросы атомной науки и техники» (серия «Математическое моделирование физических процессов») РФЯЦ-ВНИИЭФ, главный редактор журнала «Успехи кибернетики», член Научного совета при Совете безопасности Российской Федерации, член НТС ВПК РФ, член Секции «Цифровые регионы: лучшие практики и стратегии развития» Совета по развитию цифровой экономики при Совете Федерации ФС РФ, член Межведомственной рабочей группы Совета при губернаторе Самарской области по науке, технологиям и высшему образованию по направлению «Инфокоммуникационные и цифровые системы и технологии», член Консультативного научного совета Некоммерческой организации Фонд развития Центра разработки и коммерциализации новых технологий («Сколково»).

В. Б. Бетелин — заведующий кафедрой высокопроизводительных вычислений МГУ имени М. В. Ломоносова, на которой ежегодно проходят вычислительный практикум студенты механико-математического и других факультетов. Он подготовил 1 доктора и 8 кандидатов наук.

В. Б. Бетелин — автор и соавтор более 150 научных работ, в том числе 10 монографий и 9 патентов. В НИИСИ РАН издано 20 монографий и сборников статей под редакцией В. Б. Бетелина. Из числа научных работ, индексируемых в международных системах цитирования, 12 вышли в высокорейтинговых журналах, входящих в первый квартиль. Наиболее цитируемые публикации насчитывают 274 и 256 цитирований соответственно, по данным Scopus.

В. Б. Бетелин — лауреат Государственной премии РФ, награжден медалью ордена «За заслуги перед Отечеством» II степени, орденом Дружбы, орденом Почета, юбилейной медалью Совета безопасности Российской Федерации.

Распоряжением Правительства Российской Федерации от 26 февраля 2015 г. В. Б. Бетелину присуждена Премия Правительства Российской Федерации 2014 г. в области науки и техники.

Дирекция ФГУ ФНЦ НИИСИ РАН от всей души поздравляет Владимира Борисовича Бетелина — великого российского ученого, патриота и гражданина — со славным юбилеем и желает ему доброго здоровья, удачи во всех начинаниях и больших творческих успехов.

Директор ФГУ ФНЦ НИИСИ РАН д.т.н.

С. Е. Власов

РЕШЕНИЕ МЕЖДУНАРОДНОЙ КОНФЕРЕНЦИИ, ПРИУРОЧЕННОЙ К 200-ЛЕТИЮ СО ДНЯ РОЖДЕНИЯ ВЕЛИКОГО РУССКОГО МАТЕМАТИКА АКАДЕМИКА П. Л. ЧЕБЫШЁВА «МАТЕМАТИЧЕСКИЕ ИДЕИ П. Л. ЧЕБЫШЁВА И ИХ ПРИЛОЖЕНИЯ К СОВРЕМЕННЫМ ПРОБЛЕМАМ ЕСТЕСТВОЗНАНИЯ»



Пафнутий Львович Чебышёв (1821–1894)

*Международная конференция
«Математические идеи П. Л. Чебышёва и их
приложения к современным проблемам
естествознания», приуроченная к 200-летию со
дня рождения великого русского математика,
академика
Пафнутия Львовича Чебышёва*

*INTERNATIONAL CONFERENCE
“P. Chebyshev Mathematical Ideas and Their
Applications to Natural Sciences”
commemorating the 200th anniversary of
Pafnutiy Chebyshev,
the great Russian mathematician*

Обнинск, 14–18 мая; Сургут, 22–23 мая 2021 г.

14–16 мая 2021 года в г. Обнинске Калужской области и 22–23 мая 2021 г. в г. Сургуте Ханты-Мансийского автономного округа — Югры состоялась 10-я Международная конференция «Математические идеи П. Л. Чебышёва и их приложения к современным проблемам естествознания», приуроченная в этом году к 200-летию со дня рождения великого русского математика академика П. Л. Чебышёва. Мероприятие продолжает цикл предыдущих конференций, посвящённых П. Л. Чебышёву, состоявшихся в г. Обнинске и г. Сургуте в 1996–2019 гг.

Конференция была организована Правительством Калужской области, Федеральным государственным учреждением «Федеральный научный центр Научно-исследовательский институт системных исследований Российской академии наук» (ФГУ ФНЦ НИИСИ РАН), Обнинским институтом атомной энергетики — филиалом НИЯУ МИФИ.

Участников юбилейной конференции в честь великого русского математика и механика Пафнутия Львовича Чебышёва приветствовал губернатор Калужской области В. В. Шапша.

На открытии конференции от имени Президиума РАН выступил вице-президент РАН академик РАН В. В. Козлов. Сопредседатель организационного комитета и председатель программного комитета конференции, научный руководитель ФГУ ФНЦ НИИСИ РАН академик РАН В. Б. Бетелин в своём приветственном слове отметил высокую значимость наследия академика П. Л. Чебышёва для мировой науки, а также то, что П. Л. Чебышёв был фактически основателем триады: образование, наука и инженерия.

От лица ключевого организатора конференции участников приветствовал директор ФГУ ФНЦ НИИСИ РАН д.т.н. С. Е. Власов.

Глава Администрации г. Обнинска Т. Н. Леонова подчеркнула значимость в Год науки и технологий для первого наукограда РФ международной конференции столь высокого уровня.

14 мая на пленарной сессии (председатель сессии — академик В. Б. Бетелин) в Доме учёных г. Обнинска были заслушаны доклады ведущих исследователей Российской Федерации и других стран мира, которые вызвали огромный интерес присутствующих. Были представлены доклады акад. РАН В. Б. Бетелина (Россия), акад. РАН В. В. Козлова (Россия), проф. А. Papadopoulos (онлайн, Франция), проф. В. Н. Чубарикова (Россия), проф. Ya. Zengro (онлайн, Япония), чл.-корр. РАН М. В. Якобовского (Россия), проф. Р. М. Шагалиева (Россия), чл.-корр. РАН И. Б. Петрова (Россия), проф. С. А. Кашенко (Россия), проф. М. М. Лаврентьева (Россия), проф. Н. Н. Смирнова (Россия), проф. С. О. Старкова (Россия), проф. В. А. Галкина (Россия). В работе конференции участвовали представители России, Фран-

ции, Японии, Канады, Украины, Узбекистана. Россия представлена следующими городами: Москва, Петербург, Калуга, Обнинск, Великий Новгород, Нижний Новгород, Ярославль, Переславль-Залесский, Екатеринбург, Новосибирск, Сургут и др.

15 мая 2021 г. на базе Обнинского института атомной энергетики — филиала федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский ядерный университет "МИФИ"» были проведены секционные заседания по темам:

- «Дифференциальные уравнения и нелинейная динамика» (секция 1, председатель — проф. С. А. Кащенко);
- «Численное моделирование в механике сплошных сред» (секция 2, председатель — чл.-корр. РАН И. Б. Петров);
- «Вопросы современной математики» (секция 3, председатель — проф. М. М. Лаврентьев);
- «Математическое моделирование физико-механических процессов» (секция 4, председатель — проф. Н. Н. Смирнов);
- «Асимптотические методы в сингулярно возмущённых задачах» (секция 5, председатель — проф. В. Ф. Бутузов);
- «Моделирование физических процессов» (секция 6, председатель — чл.-корр. РАН М. В. Яковлевский);
- «Современные информационные технологии в моделировании сложных систем» (секция 7, председатель — проф. С. О. Старков);
- «Стендовые доклады в г. Обнинске» (секция 8).

Председатели секций особо отметили высокий уровень докладов молодых учёных.

16 мая 2021 г. участники конференции посетили памятные места, связанные с жизнью академика П. Л. Чебышёва, в Жуковском районе Калужской области в с. Спас-Прогнань, с. Окатово и с. Машково.

22 и 23 мая 2021 г. конференция продолжила свою работу в г. Сургуте под руководством заместителя председателя программного комитета проф. В. А. Галкина: в очном формате — на базе Сургутского филиала Тюменского индустриального университета и 23 мая 2021 г. — в Сургутском филиале ФГУ ФНЦ НИИСИ РАН в дистанционном формате:

- дистанционные доклады в Сургуте (секция 9, сопредседатели — доц. А. В. Гореликов, доц. Д. А. Моргун, доц. А. А. Егоров);
- «Механика композитных материалов» (секция 10, председатель — проф. Г. Л. Горынин).

Всего на конференции было представлено более 200 научных докладов. К открытию конференции был издан сборник тезисов, программа заседаний, участникам мероприятия вручен памятный значок с изображением великого русского математика академика П. Л. Чебышёва, а также памятный набор с символикой конференции.

Финансовая поддержка конференции осуществлена Правительством Калужской области и при содействии управления ИТ ПАО Сургутнефтегаз, а также компаниями: САП СНГ, БДО Юникон Солюшнс, Хьюлетт Паккард Энтерпрайз, Инлайн Груп, NetApp, Commindware.

В течение полутора столетий научная школа, созданная академиком П. Л. Чебышёвым, сохраняет лидирующее положение на главных направлениях математической теории, математического моделирования, применения и обоснования приближенных методов в нелинейных задачах, имеющих широкий спектр применения в технике, экономике, энергетике, экологии, социологии и других областях, тесно связанных с проблемами развития России как передовой индустриальной державы в рамках мирового сообщества. Важнейшим фактором развития научных направлений, принадлежащих школе академика П. Л. Чебышёва, является неиссякающий приток молодежи, о чем свидетельствуют доклады аспирантов и молодых ученых, представленные в рамках конференции. Несомненно, широкая тематика докладов конференции способствовала взаимному проникновению идей, углубленному пониманию фундаментальных проблем современной нелинейной математической физики, кибернетики, информатики, инженерных дисциплин, профессиональному росту молодежи. Следует подчеркнуть, что большинство докладов, представленных на конференции российскими учеными, выполняются в рамках грантов, поддержанных РФФИ.

1. Участники конференции отмечают, что заседания, доклады, дискуссии носили творческий характер и позволили глубже познакомиться со многими новыми результатами теории функций, урав-

нений с частными производными, динамических систем, теории аппроксимаций, методами математического моделирования, информационных технологий и их приложениями к задачам в области естественных и инженерных наук.

2. Участие в работе большого количества молодых исследователей, аспирантов и студентов, многие из которых выступали с прекрасными результатами, дает уверенность в том, что российская наука сохраняет свой потенциал.

3. Участники конференции считают целесообразным проведение следующей конференции через 2 года (в мае 2023 г.). В связи с этим участники конференции поручают оргкомитету опубликовать информацию о конференции и принять меры к изданию сборника избранных трудов конференции.

4. Участники конференции выражают признательность Правительству Калужской области, Администрации г. Обнинска, Российской академии наук, ФГУ ФНЦ «Научно-исследовательский институт системных исследований РАН», управлению ИТ ПАО Сургутнефтегаз, Обнинскому институту атомной энергетики — филиалу НИЯУ МИФИ, Российскому фонду фундаментальных исследований, филиалу ФГУ ФНЦ НИИСИ РАН в г. Сургуте, Сургутскому институту нефти и газа (филиалу ФГБОУ ВО «Тюменский индустриальный университет»), компаниям АИРКО, САП СНГ, БДО Юникон Солюшнс, Хьюлетт Паккард Энтерпрайз, Инлайн Груп, NetApp, Commindware, членам локального оргкомитета за проделанную огромную работу по организации и проведению конференции.

5. Участники конференции ходатайствуют перед Правительством Калужской области и Администрацией г. Обнинска о достойном увековечении памяти основоположника российской математической школы академика П. Л. Чебышёва. Пафнутий Львович Чебышёв — крупнейший ученый, признанный нашим государством великим русским математиком XIX столетия. Его прах покоится в церкви в с. Спас-Прогнань, построенной его предками неподалёку от г. Обнинска. Участники конференции ходатайствуют о необходимости постановки в наукограде Обнинске памятника великому учёному П. Л. Чебышёву.

6. Участники конференции ходатайствуют перед губернатором Калужской области, а также перед митрополитом Калужским и Боровским о выделении средств для оборудования лестницы, ведущей в склеп, и осушении на постоянной основе склепа, в котором покоится прах П. Л. Чебышёва.

7. В связи с крайней важностью и актуальностью проблем современного образования, поднятых на пленарной сессии, конференция считает необходимым обратиться в комитеты Государственной Думы РФ по обороне, по образованию и науке и наблюдательный совет ПАО «Сбербанк» с предложением об организации слушаний по проблемам образования и искусственного интеллекта со следующими темами повестки обсуждения: «Система образования от детских садов и до вузов — фундамент обороны и безопасности страны», «Пределы применимости систем ИИ в обороне, промышленности, образовании», «Интеллектуальные цифровые системы управления стратегически важными объектами, обеспечивающие штатное функционирование этих объектов в условиях кибератак».

8. Создать редакционный коллектив под руководством академика РАН В. Б. Бетелина для организации публикации трудов конференции. Установить объем публикаций до 10 страниц для пленарных докладов и до 5 страниц — для секционных докладов. Срок подачи материалов установить до 1 октября 2021 г. Информацию и требования к публикациям разместить на официальном сайте конференции.

Заявление принято 01 июня 2021 г.

Председатель оргкомитета
академик В. Б. Бетелин

Предложения академика В. Б. Бетелина по результатам Международной конференции «Математические идеи П.Л. Чебышёва и их приложения к современным проблемам естествознания»:

ЗА — 186 голосов, 100 %;

ПРОТИВ — 0 голосов, 0 %.

Всего проголосовавших: 186.

DOI: 10.51790/2712-9942-2021-2-2-1

ТОЧЕЧНЫЕ И РАСПРЕДЕЛЕННЫЕ МОДЕЛИ РАСПРОСТРАНЕНИЯ КОРОНАВИРУСНОЙ ИНФЕКЦИИ

В. Б. Бетелин¹, В. А. Галкин², А. В. Ряховский^{2,3}

¹ *Федеральное государственное учреждение «Федеральный научный центр Научно-исследовательский институт системных исследований Российской академии наук», г. Москва, Российская Федерация, betelin@niisi.msk.ru*

² *Сургутский филиал Федерального государственного учреждения «Федеральный научный центр Научно-исследовательский институт системных исследований Российской академии наук», г. Сургут, Российская Федерация, val-gal@yandex.ru*

³ *Сургутский государственный университет, г. Сургут, Российская Федерация, ryakhovskij_av@surgu.ru*

Аннотация: рассмотрены две модели для математического моделирования распространения инфекции. Первая модель — точечная, вторая модель — распределенная, с учетом зависимости от пространственных координат. Представлены результаты вычислительных экспериментов, основанных на применении предложенных моделей.

Ключевые слова: точечная модель, трехмерная модель, численное моделирование.

Благодарности: исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта «Вирусы» № 20-04-60123.

Для цитирования: Бетелин В. Б., Галкин В. А., Ряховский А. В. Точечные и распределенные модели распространения коронавирусной инфекции. *Успехи кибернетики*. 2021;2(2):12–20. DOI: 10.51790/2712-9942-2021-2-2-1.

LOCAL AND DISTRIBUTED MODELS OF THE CORONAVIRUS SPREAD

Vladimir B. Betelin¹, Valerii A. Galkin², Alexei V. Ryakhovskiy^{2,3}

¹ *Federal State Institution “Scientific Research Institute for System Analysis of the Russian Academy of Sciences”, Moscow, Russian Federation, betelin@niisi.msk.ru*

² *Surgut Branch of Federal State Institute “Scientific Research Institute for System Analysis of the Russian Academy of Sciences”, Surgut, Russian Federation, val-gal@yandex.ru*

³ *Surgut State University, Surgut, Russian Federation, ryakhovskij_av@surgu.ru*

Abstract: two coronavirus spread models are proposed: local and distributed with a dependence on spatial coordinates. The results of the numerical experiments with these models are presented.

Keywords: local model, 3D model, simulation.

Acknowledgements: the study was supported by RFBR, project No. 20-04-60123.

Cite this article: Betelin V. B., Galkin V. A., Ryakhovskiy A. V. Local and Distributed Models of the Coronavirus Spread. *Russian Journal of Cybernetics*. 2021;2(2):12–20. DOI: 10.51790/2712-9942-2021-2-2-1.

Введение (вирусный реактор — Земля)

Пандемия, вызванная коронавирусом COVID-19, спровоцировала на планете Земля такие геотектонические изменения, что фраза «Мир уже никогда не будет прежним» из банальной превращается в пророческую. Этот зловещий вирус стал мировым триггером, спусковым крючком, который смог запустить здоровые процессы приоритета национальных интересов перед шизофренией глобализации [1].

По сути дела, наша планета с глобальной экономикой массового потребления представляет собой вирусный реактор — аналог огромного атомного реактора без стенок в фазе катастрофического развития неконтролируемой цепной реакции размножения нейтронов, роль которых играют вирусы. Такой планетарный вирусный реактор, в котором перемешиваются неуправляемые многомиллионные

потоки больных и здоровых, превращающихся в больных, принципиально неуправляем. Другими словами, чтобы справиться с пандемией, надо отказаться от основы глобальной экономики массового потребления — многомиллионных интернациональных человеческих потоков, и в пределах отдельных стран, регионов и городов, и в масштабах всей планеты. То есть действовать на основе модели планеты как множества управляемых изолированных вирусных реакторов — типа страны, региона, города и т. д., обеспечивающих эффективную изоляцию потоков больных от здоровых. И на примере Китая, стран Евросоюза и России мы видим, что чем более жесткие и даже жестокие меры обеспечения изоляции больных от здоровых применяются на уровне страны, региона, города и особенно в мегаполисах масштаба Уханя, Москвы, Нью-Йорка, тем более эффективно удается противостоять распространению вируса.

В настоящее время, учитывая масштаб проблемы, ведущие мировые университеты и исследовательские центры создают группы для изучения и моделирования распространения COVID-19, к ним относятся: университет Джонса Хопкинса (США), Имперский колледж Лондона, Сингапурский университет технологии и дизайна (SUTD Data-Driven Innovation Lab) и др. Разработчики прикладного программного обеспечения, например, Comsol Multiphysics, также принимают усилия для создания программного обеспечения моделирования распространения инфекции. Среди отечественных исследователей заявлены группы экспертов Сбербанка и НТИ СПбПУ. Одной из наиболее популярных моделей для исследования распространения инфекции является модель SIR (Susceptible-Infected-Recovered). Так, например, исследователи из Оксфорда построили модель COVID-19 в рамках подхода SIR на основе данных распространения инфекции в Италии и Великобритании [2].

Стандартная SIR-модель не учитывает рождаемость и смертность и задается системой ОДУ из трех уравнений. Данный тип моделей учитывает, что инфекционное заболевание завершается и человек «удаляется» из числа инфицированных и уязвимых, либо приобретая иммунитет (SIR), либо умирая (SID – Susceptible-Infected-Dead). В настоящий момент разработано множество различных детерминистических моделей распространения заболеваний и активно ведется разработка новых моделей. Так, модель SIS (Susceptible-Infected-Susceptible) используется, если заболевание передается воздушно-капельным путем в большом городе (популяция относительно гомогенна) и не оставляет после себя иммунитета, т. е. вся популяция разбивается на две группы: инфицированных и уязвимых. SEIRD-модель учитывает латентный период заболевания. В этом случае вся популяция делится на пять классов: восприимчивые, латентные, инфицированные, невосприимчивые, умершие. SEIHFR-модель делит популяцию уже на шесть классов: восприимчивые, латентные, инфицированные, госпитализированные, непохороненные, невосприимчивые. Данная модель используется для изучения динамики передачи заболеваний после вакцинации. В SEIR-моделях (Susceptible-Exposed-Infected-Recovered) в отличие от предыдущих учитывается инкубационный период. Модель записывается в виде системы трех уравнений в частных производных и учитывает распределение по возрасту индивидов. В работе группы из Италии [3] предложена модель SIDARTHE (Susceptible-Infected-Diagnosed-Ailing-Recognized-Threatened-Healed-Extinct), описывающая восемь стадий протекания заболевания. Другая восьмикомпонентная модель [4] была предложена группой из США, и результаты данной модели находятся в согласии с данными распространения инфекции в городе Ухане, Китай. Указанные модели представляют собой системы обыкновенных дифференциальных уравнений, которые обычно решаются методами Рунге–Кутты. Альтернативный подход к моделированию основан на использовании нейронных сетей. Исследователи из Массачусетского технологического института [5] разработали нейронную сеть, обученную на данных по динамике инфекции из города Уханя, Италии, США и Южной Кореи и позволяющую моделировать последствия введения и снятия карантина.

Распределенная математическая модель задачи, рассматриваемая в данной работе, состоит из системы уравнений переноса, описывающих изменение во времени плотностей инфицированного, неинфицированного и иммунизированного населения, а также начальных условий. Изменение исследуемых величин в пространстве моделируется за счет введения в уравнения диффузионных и конвективных слагаемых. Для численного решения задач данной модели использовались многократно апробированные методы вычислительной гидродинамики (метод контрольного объема, неявная по времени схема) [6].

Математические модели «коронавирусного реактора»

Рассматривается популяция, в которой распространяется инфекционный процесс, основанный на взаимодействии процессов переноса и взаимных превращений (реакций) элементов системы. По своей природе динамика таких систем основана на соотношениях баланса (законов сохранения), типичных для кинетической теории, для уравнений Больцмана в теории газов, ядерных реакторов, кинетической теории коагуляции и т. п.

Конечно, разработка моделей столь масштабного и быстро протекающего явления изнутри дело сложное и многих данных не хватает. Но, в целом, можно усмотреть аналогию текущей ситуации с процессами, происходящими в ядерном реакторе, что позволяет рассматривать все происходящее как «вирусный» реактор, в котором «выгорает» топливо — люди, вступающие во взаимодействие с вирусной инфекцией. С этой точки зрения изолировавшиеся территории (страны) можно рассматривать как «вирусный котел» с непроницаемыми границами по перекрытому властями периметру, в котором взаимодействует смесь из здоровых и зараженных людей. Здоровые в результате перемешивания за счет контактов с зараженными также становятся зараженными. Последние могут превратиться в больных, часть из которых выздоравливает (возможно, приобретая иммунитет), а часть, увы, гибнет.

В рамках этой аналогии важно понять, что является реальным управляющим фактором наподобие управляющих стержней (СУЗ — система управления защитой) в ядерном реакторе. Наличие управления позволяет «погасить» реактор или его «разогнать». Из публикуемых статистических сводок можно пока выявить важный управляющий фактор — это коэффициент перемешивания здоровых и зараженных людей. Этот коэффициент существенно связан с наличием нелокальных связей в реакторе, прежде всего — с транспортными потоками (метро, наземный транспорт), поскольку именно они способствуют перемешиванию населения и сопутствующей передаче инфекции.

Для описания распространения инфекции используются величины n_1, n_2, n_3 , соответственно обозначающие концентрации «неинфицированного», «инфицированного» и «иммунизированного» населения, именуемые ниже состояниями элементов системы. Ниже, там, где это не влечет за собой потери смысла, состояния элементов системы будем обозначать символами соответствующих концентраций. Рассматриваются две модели — первая модель точечная, не предусматривающая пространственного распределения величин, а вторая — распределенная, в которой зависимость от пространственных координат учитывается за счет введения диффузионных и конвективных слагаемых. Включение диффузионного блуждания приводит к моделям типа «reaction-diffusion», рассматривавшимся в работах по теории горения и детонации, цепных реакций и самоорганизации, в частности, см. [7–9].

1. Точечная модель коронавирусного реактора

Модель пространственно-однородной системы (без учета пространственного переноса) соответствует в задачах ядерной энергетики [10, 11] так называемому точечному реактору. Она основывается на системе обыкновенных дифференциальных уравнений для динамики неизвестных величин (концентраций) $n_1(t), n_2(t), n_3(t)$:

$$\begin{cases} \frac{dn_1}{dt} = -\lambda_1 n_1 n_2 + \alpha n_3 + q_1, \\ \frac{dn_2}{dt} = \lambda_1 n_1 n_2 - \gamma n_2 - \lambda n_2 + \beta n_3 + q_2, \\ \frac{dn_3}{dt} = \gamma n_2 - (\alpha + \beta) n_3 + q_3, \end{cases} \quad (1)$$

где t — время; $\alpha \geq 0$ — интенсивность перехода из состояния n_3 в состояние n_1 ; $\beta \geq 0$ — интенсивность перехода из состояния n_3 в состояние n_2 ; $\gamma \geq 0$ — интенсивность перехода из состояния n_2 в состояние n_3 ; $\lambda \geq 0$ — интенсивность смертности; λ_1 — интенсивность заражения, т.е. перехода элементов из состояния n_1 в состояние n_2 ; $q_i(t) \geq 0, i = 1, 2, 3$ — источниковые члены. По существу система (1) является балансом (системой законов сохранения) актов «рождения» и «гибели» элементов системы в результате их взаимодействия. Параметр $\lambda_1 \geq 0$ задает интенсивность заражения при перемешивании здоровых и инфицированных представителей популяции. В результате такого взаимодействия с интенсивностью λ_1 происходит превращение здоровых представителей системы в зараженных.

Начальные значения величин предполагаются известными:

$$n_i(0) = n_{i0}, \quad i = 1, 2, 3,$$

причем $n_{i0} \geq 0, i = 1, 2, 3$.

Если $\lambda = 0$, $q_i = 0$, $i = 1, 2, 3$, то система (1) определяет соотношение сохранения для суммы величин n_1, n_2, n_3 . Действительно, в этом случае сумма правых частей системы (1) будет равна нулю, т. е.:

$$\frac{dn_1}{dt} + \frac{dn_2}{dt} + \frac{dn_3}{dt} = 0,$$

откуда следует, что

$$n_1(t) + n_2(t) + n_3(t) \equiv \text{const.}$$

Теорема. Правая часть системы (1) является оператором больцмановского типа. Если параметры $\alpha, \beta, \gamma, \lambda_1, \lambda$ и значения функций q_i , $i = 1, 2, 3$, неотрицательны, то оператор в правой части системы (1) обладает свойствами диссипативности и неотрицательности при $n_i \geq 0$ [12, 13]. Соответственно, система (1) при неотрицательных начальных данных обладает единственным, неотрицательным, гладким решением для всех значений времени $t \geq 0$.

2. Распределенная модель

Рассматривается задача переноса на сфере единичного радиуса $S = \{ (x, y, z) \in \mathbb{R}^3 : x^2 + y^2 + z^2 = 1 \}$. Математической моделью задачи является система уравнений:

$$\begin{cases} \frac{\partial n_1}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) n_1 = -\lambda_1 n_1 n_2 + \alpha n_3 + \sigma_1 \Delta n_1 + q_1, \\ \frac{\partial n_2}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) n_2 = \lambda_1 n_1 n_2 - \gamma n_2 - \lambda n_2 + \beta n_3 + \sigma_2 \Delta n_2 + q_2, \\ \frac{\partial n_3}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) n_3 = \gamma n_2 - (\alpha + \beta) n_3 + \sigma_3 \Delta n_3 + q_3, \end{cases} \quad (2)$$

где t — время; $n_1(r, \theta, \phi, t)$, $n_2(r, \theta, \phi, t)$, $n_3(r, \theta, \phi, t)$ — неизвестные величины; $\alpha, \beta, \gamma, \lambda, \lambda_1$ — параметры задачи, определяемые так же, как и для системы (1); $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$ — коэффициенты диффузии; (r, θ, ϕ) — сферические координаты; $q_i(t) \geq 0$, $i = 1, 2, 3$ — источниковые члены. Поле скорости $\mathbf{v}$ предполагается заданным.

Считается, что в начальный момент времени $t = 0$ известны распределения величин $n_1(r, \theta, \phi, t)$, $n_2(r, \theta, \phi, t)$, $n_3(r, \theta, \phi, t)$:

$$n_i(r, \theta, \phi, 0) = \psi_i(r, \theta, \phi), \quad i = 1, 2, 3.$$

Тестовые расчеты

1. Точечная модель

Численное решение системы (1) производилось при помощи схемы Эйлера. Значения параметров модели были выбраны следующими:

$$\lambda_1 = 5, \gamma = 5, \alpha = \beta = 0, \lambda = 0.1,$$

источниковый член был равен:

$$q(t) = 0.1.$$

Начальные условия имели вид:

$$n_1(0) = 0.99999, \quad n_2(0) = 0.00001, \quad n_3(0) = 0.$$

Результаты вычислительного эксперимента приведены на рис. 1, который демонстрирует осцилляционный режим, типичный для распространения COVID-19.

2. Распределенная модель

Дискретный аналог для системы (2) был построен при помощи метода контрольного объема с использованием полностью неявной схемы [6]. Для решения СЛАУ, полученной в результате дискретизации, был использован метод переменных направлений.

Далее приводятся результаты вычислительных экспериментов для распределенной модели. В проведенной серии расчетов были использованы следующие значения параметров:

$$\lambda_1 = 5, \gamma = 5, \alpha = \beta = 0, \lambda = 0.1.$$

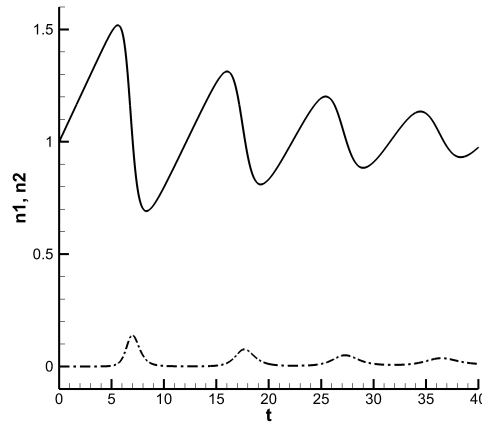


Рис. 1. Зависимости n_1 и n_2 от времени. Сплошная линия — n_1 , штрих-пунктирная линия — n_2

Коэффициенты диффузии предполагались постоянными и равными друг другу:

$$\sigma_1 = \sigma_2 = \sigma_3 = \sigma = 1.$$

Заданное на сфере поле скорости $v = (v_x, v_y, v_z)$ имеет вид:

$$v_x = -z \sin y, \quad v_y = z \sin x, \quad v_z = x \sin y - y \sin x.$$

Начальные условия выбраны следующим образом:

$$\begin{aligned} n_1(r, \theta, \phi, 0) &= 1, \\ n_2(r, \theta, \phi, 0) &= \begin{cases} A, & \text{если } \theta \in [\frac{\pi}{4} - \delta, \frac{\pi}{4} + \delta], \phi \in [\pi - \delta, \pi + \delta], \\ 0, & \text{если } \theta \notin [\frac{\pi}{4} - \delta, \frac{\pi}{4} + \delta] \text{ или } \phi \notin [\pi - \delta, \pi + \delta], \end{cases} \\ n_3(r, \theta, \phi, 0) &= 0, \end{aligned}$$

где A и δ — параметры, определяющие величину и локализацию начального распределения n_2 . Их значения были выбраны равными $A = 1000$, $\delta = 0.05$. Начальные распределения n_1 и n_2 изображены соответственно на рис. 2 и 3. Результаты вычислительных экспериментов приведены на рис. 4 и 5, которые иллюстрируют соответственно уменьшение численности здорового населения и увеличение численности инфицированного.

В качестве интегральных характеристик величин $n_1(r, \theta, \phi, t)$, $n_2(r, \theta, \phi, t)$, $n_3(r, \theta, \phi, t)$ были рассчитаны поверхностные интегралы от этих функций по сфере S :

$$N_i(t) = \iint_S n_i(r, \theta, \phi, t) dS, \quad (i = 1, 2, 3).$$

На рис. 6 приведена зависимость интегральных характеристик $N_i(t)$, $i = 1, 2, 3$ от времени для расчета при значении $\sigma = 1$.

Заключение

Предложены две модели для распространения коронавирусной инфекции — точечная (1) и распределенная (2), учитывающая пространственную зависимость неизвестных. Проведена серия вычислительных экспериментов с использованием данных моделей, которые указывают на возможность близкой к периодической (рис. 1) динамики в точечной модели. Эта модель соответствует реактору без пространственных границ. Эволюция коронавирусной инфекции (новых заражений) в планетарном масштабе качественно подтверждает это наблюдение (см. рис. 7).

Для полной настройки моделей необходимы верифицированные экспериментальные данные, позволяющие достоверно оценить коэффициенты.

Расчеты показывают, что с течением времени практически все население станет инфицированным (доля инфицированного населения в популяции приближается к единице). Для модели вирусного

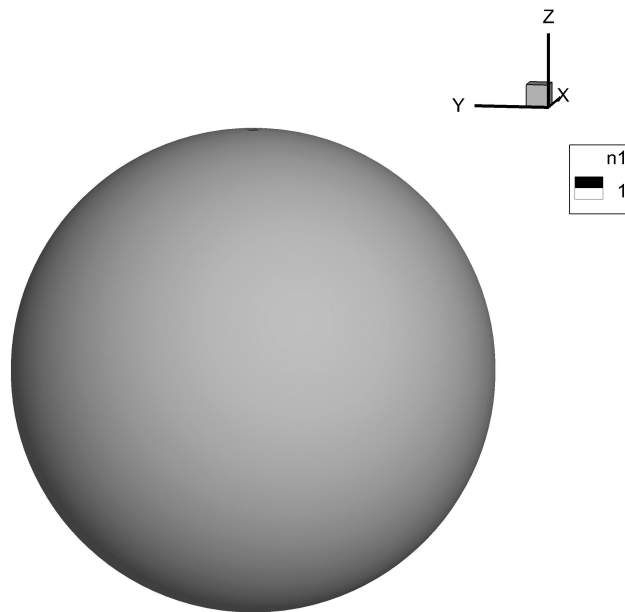


Рис. 2. Распределение n_1 на момент времени $t = 0$

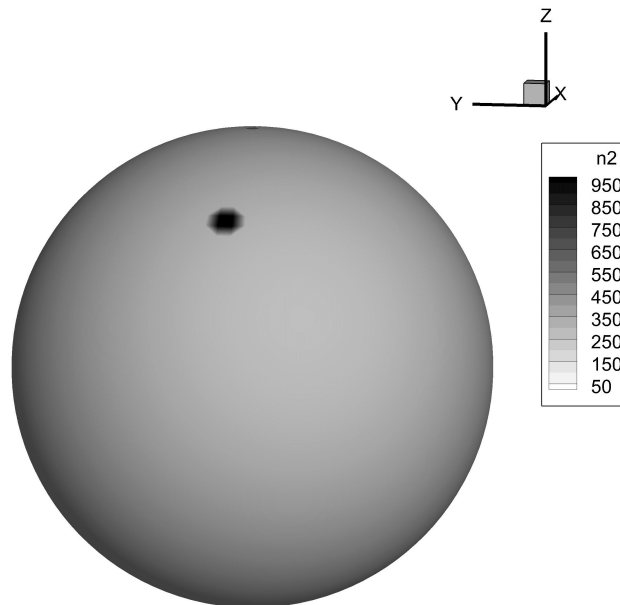


Рис. 3. Распределение n_2 на момент времени $t = 0$

реактора (без учета пространственного распределения населения и предположений о естественной иммунизации) на основе подсчитанной величины коэффициента перемешивания 0,118136 оценка численности больных на ранней стадии наблюдений распространения инфекции (19 апреля 2020 г.) получилась равной 23 966 чел. Фактическое число больных в Москве с практически непроницаемой на эту дату границей, по официальным данным, было равно 24 433. На дальнейший прогноз начал влиять пропускной режим, который изменил коэффициент перемешивания.

Возможен сценарий управления коэффициентом перемешивания, когда он становится практически нулевым. В этом случае доля инфицированных может быть зафиксирована на заданном уровне меньше единицы, т. е. ситуация может быть «заморожена» с выходом графика числа инфицированных людей на горизонтальное плато, но только в течение времени действия малости коэффициента перемешивания. Тогда система застывает в метастабильном состоянии. Но это чревато потрясениями уже в иной области – в экономике. Как только ограничения будут сняты, вирусный реактор снова пустится в разгон!

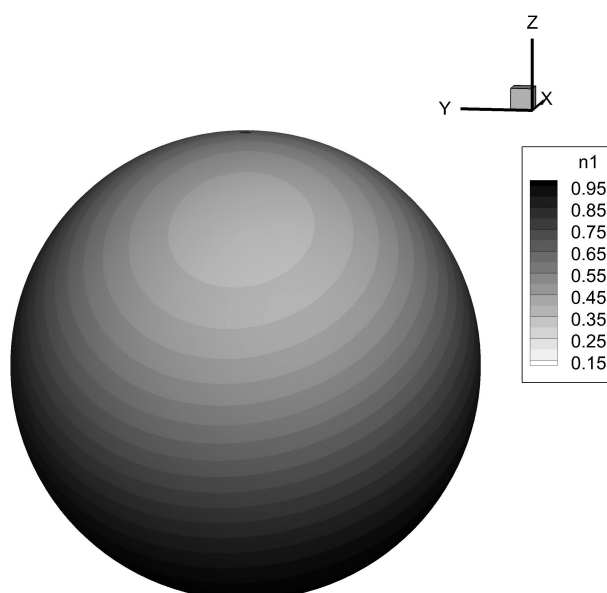


Рис. 4. Распределение n_1 на момент времени $t = 0.25$ при $\sigma = 1$

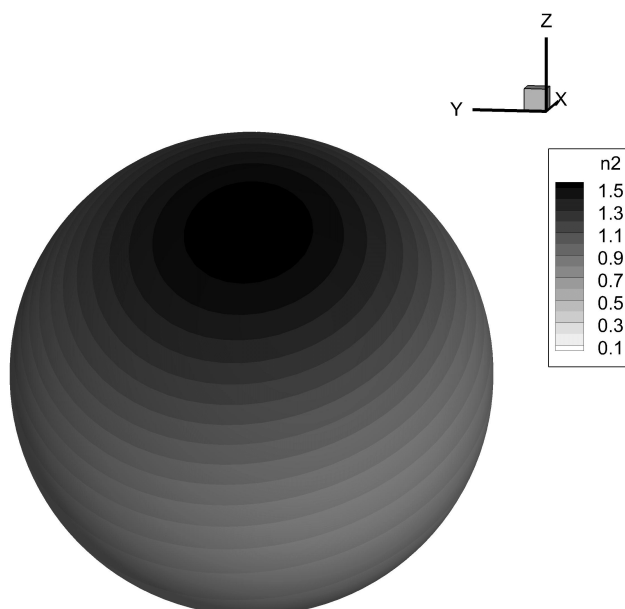


Рис. 5. Распределение n_2 на момент времени $t = 0.25$ при $\sigma = 1$

Проблему решает только вакцинация населения (при условии разработки эффективной вакцины, либо естественная иммунизация населения, конечно, если она имеет место за счет приобретенного иммунитета у переболевших), что позволяет существенно снизить долю инфицированных и подавить эпидемию.

Послесловие

После отправки данной статьи в редакцию журнала события, связанные с распространением коронавирусной инфекции в РФ (см. рис. 8), побудили авторов вновь обратить внимание на существенное влияние фактора перемешивания на возбуждение колебательных режимов в популяции. Открытая граница с Индией привела в течение мая-июня 2021 г. к значительному всплеску количества инфицированных коронавирусной инфекцией на уровне, превосходящем эффекты годовой давности. Так что это является очередным подтверждением явления коронавирусного реактора в глобальном масштабе, которое требует детального исследования на основе точных статистических данных.

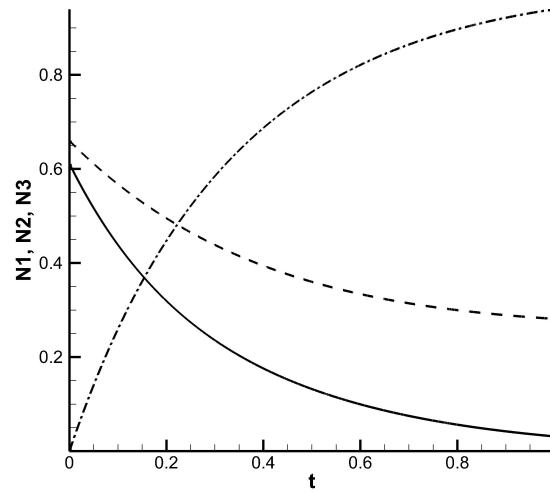


Рис. 6. Зависимость величин N_1 , N_2 , N_3 от времени в случае $\sigma = 1$. Штриховая линия — N_1 , сплошная линия — N_2 , штрих-пунктирная линия — N_3

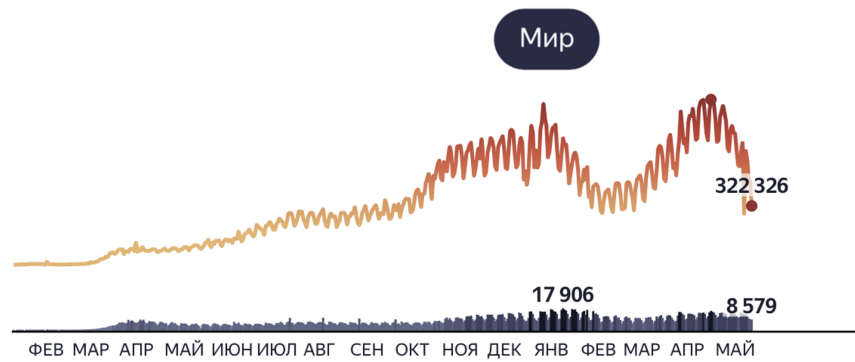


Рис. 7. Данные на 26.05.2021: число новых заражений — красный график и смертей — черный график (из открытых источников: Яндекс. Коронавирус: статистика)



Рис. 8. Данные по РФ на 23.06.2021 (из открытых источников: Яндекс. Коронавирус: статистика)

ЛИТЕРАТУРА

1. Григорьев А. Вирусный реактор Земля. *Аргументы недели. Экономика*. 13.05.2020;18(712).
2. Lourenço J., Paton R., Thompson C., Klenerman P., Gupta S. Fundamental Principles of Epidemic Spread Highlight the Immediate Need for Large-Scale Serological Surveys to Assess the Stage of the SARS-CoV-2 Epidemic. 2020. Preprint at <https://www.medrxiv.org/content/early/2020/03/26/2020.03.24.20042291>.
3. Giordano G., Blanchini F., Bruno R., Colaneri P., Di Filippo A., Di Matteo A., Colaneri M. Modelling the COVID-19 Epidemic and Implementation of Population-Wide Interventions in Italy. *Nat. Med.* 2020;26:855–860. DOI: 10.1038/s41591-020-0883-7.
4. Ndaïrou F., Area I., Nieto J. J., Torres D. F. M. Mathematical Modeling of COVID-19 Transmission Dynamics with a Case Study of Wuhan. *Chaos, Solitons & Fractals*. 2020;135. DOI: 10.1016/j.chaos.2020.109846.
5. Dandekar R., Barbastathis G. Quantifying the Effect of Quarantine Control in COVID-19 Infectious Spread Using Machine Learning. 2020. Preprint at <https://doi.org/10.1101/2020.04.03.20052084>.
6. Патанкар С. Численные методы решения задач теплообмена и динамики жидкости. М.: Энергоатомиздат; 1984. 152 с.
7. Kolmogorov A., Petrovskii I., Piskunov N. Study of a Diffusion Equation That Is Related to the Growth of a Quality of Matter and Its Application to a Biological Problem. *Moscow University Mathematics Bulletin*. 1937;1:1–26.
8. Зельдович Я. Б., Франк-Каменецкий Д. А. Теория теплового распространения пламени. *Журн. физ. химии*. 1938;12(1):100–105.
9. Николис Г., Пригожин И. Самоорганизация в неравновесных системах: От диссипативных структур к упорядоченности через флуктуации. М.: Мир; 1979. 512 с.
10. Шихов С. Б. Вопросы математической теории ядерных реакторов (линейный анализ). М.: Атомиздат; 1973. 374 с.
11. Ершов Ю. И., Шихов С. Б. Математические основы теории переноса. Т. 1. Основы теории. М.: Атомиздат; 1985. 231 с.
12. Галкин В. А. Уравнение Смолуховского. М.: ФИЗМАТЛИТ; 2001. 336 с.
13. Галкин В. А. Анализ математических моделей: системы законов сохранения, уравнения Больцмана и Смолуховского. М.: БИНОМ. Лаборатория знаний; 2009. 408 с.

DOI: 10.51790/2712-9942-2021-2-2-2

ВЫСОКОСКОРОСТНЫЕ ОПТИЧЕСКИЕ ШИНЫ ПЕРЕДАЧИ ДАННЫХ НА ПЕЧАТНЫХ ПЛАТАХ ДЛЯ МИКРОПРОЦЕССОРНЫХ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ СИСТЕМ

А. С. Ахманов^{1,2}, В. И. Соколов^{1,2}, В. Я. Панченко¹

¹ *Федеральный научно-исследовательский центр «Кристаллография и фотоника» Российской академии наук, г. Москва, Российская Федерация*

² *Федеральное государственное учреждение «Федеральный научный центр Научно-исследовательский институт системных исследований Российской академии наук», г. Москва, Российская Федерация*

Аннотация: рассмотрены вопросы формирования оптического интерконнекта между СБИС на печатных платах с использованием фторсодержащих полимерных материалов. Обсуждаются различные аспекты технологии УФ-фотолитографии для создания полимерных волноводов. Приводятся результаты исследований, направленных на формирование высокоскоростной оптической шины передачи данных для микропроцессорных вычислительных систем (суперЭВМ) с использованием массивов полимерных волноводов на печатной плате.

Ключевые слова: оптические межсоединения, полимерные волноводы, оптическая шина передачи данных на печатной плате, суперЭВМ.

Благодарности: авторы благодарят академика В. Б. Бетелина за активную поддержку концепции развития оптических межсоединений для суперЭВМ и плодотворные обсуждения. Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 18-29-20102).

Для цитирования: Ахманов А. С., Соколов В. И., Панченко В. Я. Высокоскоростные оптические шины передачи данных на печатных платах для микропроцессорных вычислительных систем. *Успехи кибернетики*. 2021;2(2):21–28. DOI: 10.51790/2712-9942-2021-2-2-2.

CPB HIGH-SPEED OPTICAL DATA BUSES FOR MICROPROCESSOR SYSTEMS

Alexander S. Akhmanov^{1,2}, Viktor I. Sokolov^{1,2}, Vladislav Ya. Panchenko¹

¹ *Shubnikov Institute of Crystallography, Federal Research Center Crystallography and Photonics, Russian Academy of Sciences, Moscow, Russian Federation*

² *Federal State Institution “Scientific Research Institute for System Analysis of the Russian Academy of Sciences”, Moscow, Russian Federation*

Abstract: the study deals with the optical interconnect between VLSIs on a PCB with fluorine-containing polymers. Various aspects of the UF photolithography for making polymer waveguides are discussed. The results of the research aimed at making a high-speed optical data bus for SoC (supercomputers) with PCB polymer waveguide arrays.

Keywords: optical interconnects, polymer waveguides, PCB optical data bus, supercomputer.

Acknowledgements: we would like to thank V. Betelin, a member of the Russian Academy of Sciences, for his prominent support of the supercomputer optical interconnects, and instructive discussions. This study is supported by RFBR, project No. 18-29-20102.

Cite this article: Akhmanov A. S., Sokolov V. I., Panchenko V. Ya. CPB High-Speed Optical Data Buses for Microprocessor Systems. *Russian Journal of Cybernetics*. 2021;2(2):21–28. DOI: 10.51790/2712-9942-2021-2-2-2.

Введение

Современные микропроцессорные системы создаются путем объединения большого числа сверхбольших интегральных схем (СБИС), выполняющих различные функции (микропроцессоры, схемы памяти, схемы управления и коммутации, управления вводом-выводом и др.), в один модуль с помощью металлических проводников на печатной плате и соединения модулей посредством кросс-плат. Данные между СБИС на печатных платах передаются электрическими сигналами. Быстродействие

микропроцессорной системы в целом зависит от быстродействия входящих в ее состав СБИС, а также от скорости обмена данными между ними. Коммуникационная среда, объединяющая процессоры, память и системы ввода-вывода, является одним из ключевых элементов суперЭВМ.

Наиболее важными параметрами коммуникационной среды (интерконнекта) для перспективных суперЭВМ экзафлопсной производительности являются пропускная способность (ширина полосы BW) и потребляемая мощность. Их оценку можно сделать путем экстраполяции параметров, известных для современных ЭВМ петафлопсной производительности. В настоящее время введены в эксплуатацию несколько суперЭВМ производительностью 20–200 петафлоп/сек. Потребляемая мощность этих ЭВМ находится в диапазоне 2–30 МВт, мощность, потребляемая интерконнектом, составляет около 30 % полной мощности.

Интегральной характеристикой скорости передачи данных является бисекционная пропускная способность интерконнекта, т.е. скорость передачи между двумя условными половинами ЭВМ. Для эффективной работы ЭВМ производительностью несколько петафлопс, бисекционная пропускная способность составляет порядка 100 Тбит/сек, число отдельных каналов связи достигает 10^6 . Масштабирование этих параметров на ЭВМ производительностью 1 экзафлопс дает оценку потребляемой мощности порядка 50 МВт, что требует разработки принципиально новых методов передачи и обработки данных в ЭВМ.

Бисекционная пропускная способность интерконнекта экзафлопсной ЭВМ должна находиться в диапазоне 100 Петабит/сек – 1 Экзабит/сек, а число каналов связи 10^8 – 10^9 . При этом энергопотребление в одном канале должно составлять 1 пикоДжоуль/бит – 100 фемтоДжоулей/бит, или 0,1–1 мВт/Гбит/сек. Выше приведены средние оценки параметров интерконнекта в экзафлопсной ЭВМ, позволяющие указать область параметров для исследований и разработок новых технологий его создания. Интерконнект является сложной иерархической системой и состоит из подсистем коммуникаций: внутри процессорного ядра (1 мм), между ядрами и памятью на процессорном кристалле (1 см), между процессорами на вычислительном узле (node, печатная плата 10–50 см), в модуле между печатными платами (backplane кросс-панель 100 см), между модулями в стойке (1–3 м) и между стойками (10–100 м). Необходимые скорости передачи на каждой из этих ступеней существенно зависят от конкретной архитектуры вычислительной системы.

Коммуникационные среды, основанные на электрических линиях связи, существенно ограничены по быстродействию и параллелизму вследствие физических ограничений, поэтому перспективным является переход на оптические линии на всех уровнях иерархии. Основные преимущества оптических технологий для высокоскоростной передачи информации в суперЭВМ и микропроцессорных системах следующие:

- существенное уменьшение временных задержек (оптические сигналы распространяются со скоростью света);
- ширина полосы среды практически не ограничена — до 100 ТГц. Скорость передачи по одному каналу определяется только полосами источника света и фотоприемника;
- для увеличения информационной емкости канала можно использовать методы мультиплексирования (TDM и WDM);
- фотоны не взаимодействуют друг с другом, можно минимизировать взаимные наводки соседних линий и внешние воздействия;
- меньше проблем с рассеиваемой в тепло мощностью, тепловыделение не увеличивается с длиной соединений;
- нет проблем с согласованием импедансов линий и нагрузок;
- нет ограничений для архитектур, связанных с двумерностью разводки;
- при помощи оптических технологий можно реализовать трехмерные глобальные межсоединения большого числа СБИС;
- оптическую связь можно применять на всех уровнях иерархии межсоединений в суперЭВМ;
- существенное преимущество оптических линий связи состоит также в том, что для увеличения скорости передачи не требуется принципиально изменять архитектуру линий, как это делается для электрических соединений.

Технология оптических межсоединений значительно превосходит технологию электрических соединений по производительности и плотности расположения каналов. Однако необходимость ис-

пользования дополнительных элементов — оптических приемопередатчиков (трансиверов) приводит к усложнению конструкции и неизбежному росту как стоимости, так и потребляемой мощности.

В настоящем исследовании нами описан подход к решению данной проблемы с использованием массивов полимерных оптических волноводов на печатных платах. В отличие от электрических шин на основе металлических проводников, тепловыделение в таком интерконнекте происходит, в основном, при преобразовании электрического сигнала в оптический и обратно, т.е. источниками тепла являются лазеры и фотоприемники. Поэтому для сокращения энергопотребления интерконнекта необходима разработка архитектур и топологий, минимизирующих число таких преобразований. Предлагаемый подход к созданию высокоскоростных оптических шин передачи данных на основе «сквозных» оптических каналов предусматривает:

- оптические межсоединения на кристалле (процессорном ядре) и между ядрами с использованием волноводов из кремния в окиси кремния. Поскольку кремниевые волноводы прозрачны в телекоммуникационной области длин волн вблизи 1.5 мкм, именно этот спектральный диапазон представляется оптимальным для «сквозных» межсоединений;

- оптические межсоединения между процессорами на вычислительном узле и между узлами на кросс-плате на основе полимерных волноводов. При этом концепция «сквозных» межсоединений предполагает, что полимерные волноводы на печатной плате состыкованы непосредственно с кремниевыми волноводами на чипе. Отметим, что обычные углеводородные полимерные материалы имеют значительное поглощение вблизи 1.5 мкм. Поэтому для уменьшения оптических потерь и тепловыделения в оптической шине разработаны и исследованы специальные фторсодержащие полимеры, обладающие повышенной оптической прозрачностью и низким поглощением в ближней ИК области спектра;

- соединения между модулями в стойке и между стойками реализуются с помощью жгутов оптических волокон, состыкованных с полимерными волноводами на печатной плате.

В статье приведены результаты совместных исследований, проведенных в Институте проблем лазерных и информационных технологий РАН и Научно-исследовательском институте системных исследований РАН по разработке технологий создания полимерных канальных волноводов на печатных платах. Эти работы ведутся с 2005 года по инициативе академика В.Б. Бетелина.

Формирование оптических волноводов из фторсодержащих полимерных материалов на печатной плате методом контактной фотолитографии

Для создания оптических шин передачи данных наиболее перспективными являются полифункциональные акриловые мономеры с большой степенью фторирования. Они обладают высокой оптической прозрачностью в телекоммуникационных диапазонах длин волн и высокой активностью в процессе радикальной фотополимеризации [1–14]. Поэтому такие мономеры могут быть использованы для формирования полимерных волноводов методом УФ-фотолитографии, в основе которого лежит реакция радикальной фотополимеризации мономеров под действием УФ-актинического излучения. Формирование полимерных волноводов методом контактной фотолитографии является трехступенчатым процессом. Он включает формирование на печатной плате буферного полимерного слоя с низким показателем преломления; формирование на буферном слое световедущих жил волноводов путем освещения жидкой композиции с высоким показателем преломления УФ-излучением через фотошаблон; наращивание световедущих жил покровным полимерным слоем с низким показателем преломления, рис. 1.

Фотография многомодовых волноводов, изготовленных данным методом, приведена на рис. 2. Ширина и высота волноводов составляет 50 мкм, расстояние между волноводами равно 200 мкм.

1. Формирование массивов полимерных волноводов с высокой степенью интеграции

Для увеличения степени интеграции полимерных волноводов на печатной плате необходимо уменьшать расстояние между световедущими жилами. Это предъявляет особые требования как к композициям, так и ко всему фотолитографическому процессу. Данная задача была решена путем использования актинического излучения с длиной волны 250–280 нм. Это позволило формировать массивы волноводов с плотностью упаковки до 625 шт/см (рис. 3), что в 2 раза превосходит плотность упаковки волноводов в оптической шине «Green Optical Link», разработанной фирмой IBM [15].

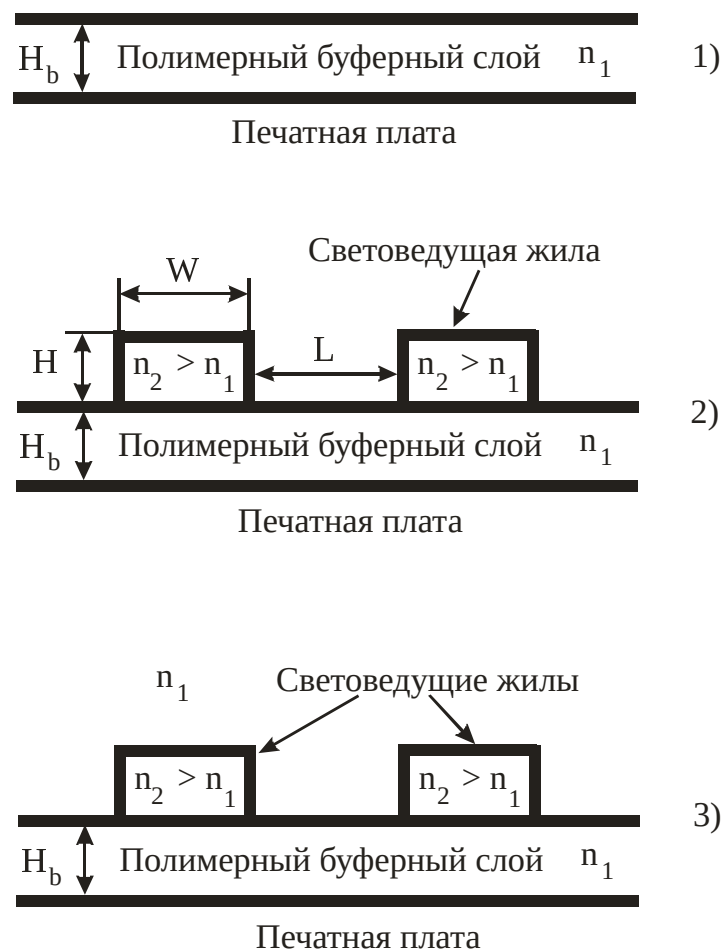


Рис. 1. Этапы формирования полимерных волноводов на печатной плате методом УФ-фотолитографии. n_1 и n_2 — показатели преломления буферного слоя и световедущей жилы соответственно, W — ширина, H — высота волновода, H_b — толщина буферного слоя, L — расстояние между волноводами

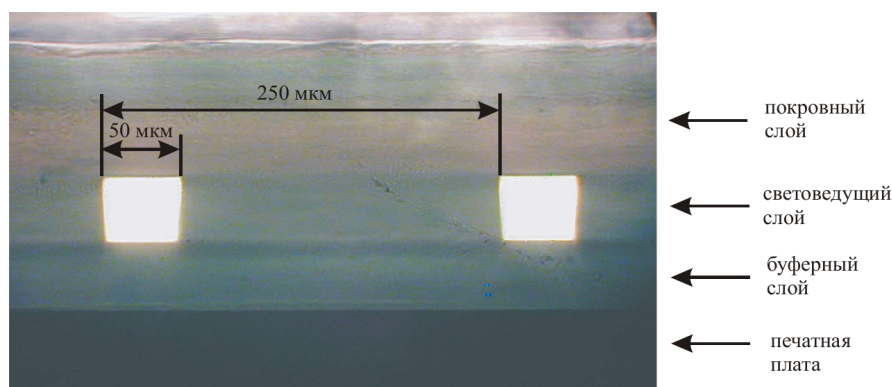


Рис. 2. Фотография многомодовых полимерных волноводов, изготовленных на печатной плате методом контактной фотолитографии под действием актинического излучения с длиной волны 365 нм. Вид с торца

2. Формирование полимерных волноводов на гибких подложках

Идея интегрально-оптического интерконнекта на печатной плате, позволяющего объединить массивы полимерных волноводов на кросс-плате и дочерних платах в единую оптическую шину передачи данных, иллюстрируется рис. 4. На этом рисунке представлена схема кросс-панели (motherboard) и трех дочерних плат (daughterboard), вставленных в кросс-панель. Оптический сигнал, распространяющийся по полимерному волноводу на кросс-панели, перенаправляется в полимерный волновод на

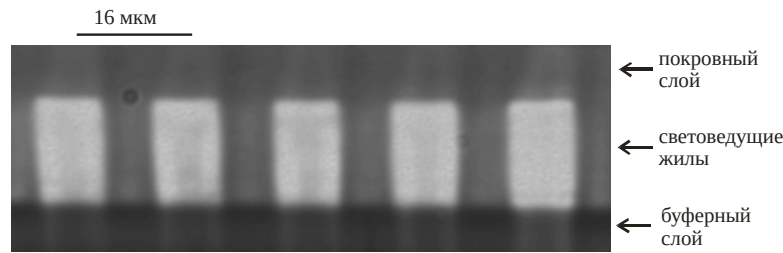


Рис. 3. Фотография массива полимерных волноводов, сформированных на печатной плате методом УФ-фотолитографии под действием излучения с длиной волны 250–280 нм. Ширина и высота волноводов составляют 10 и 15 мкм соответственно, расстояние между световедущими жилами равно 6 мкм

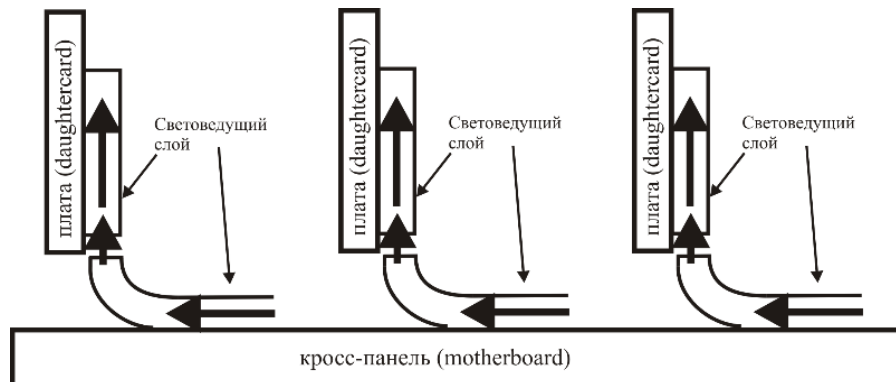


Рис. 4. Схема оптического интерконнекта на основе полимерных волноводов на гибкой подложке. Стрелками показано направление распространения оптического сигнала от кросс-платы к дочерним платам

дочерней плате, претерпевая поворот на 90 градусов.

Конкретная реализация оптического интерконнекта может быть осуществлена с помощью массивов полимерных волноводов на гибких пластиковых подложках, допускающих поворот на 90 градусов при радиусе изгиба 10–20 мм. Преимуществами шлейфов на основе полимерных волноводов по сравнению с волоконно-оптическими шлейфами являются более высокая плотность упаковки волноводов в массиве и простота формирования торцов.

Для создания гибких оптических межсоединений использовались композиции из фторсодержащих мономеров — акрилатов. Вид шлейфа, включающего двенадцать волноводов, дан на рис. 5 [16, 17]. Ширина волноводов составляет 40 мкм, высота — 20 мкм, расстояние между волноводами в массиве — 120 мкм. Торец шлейфа, показанный на рис. 5в, получен методом скрайбирования пластиковой подложки с последующим сколом по линии надсечки.

3. Формирование оптических межсоединений в нескольких уровнях многослойной печатной платы

При создании оптоэлектронных печатных плат с интегрированной оптической шиной передачи данных желательно иметь возможность размещать полимерные волноводы в нескольких уровнях многослойной платы. Это позволяет, с одной стороны, существенно расширить пропускную способность оптической шины, а с другой — открывает новые возможности для архитектурных решений при создании оптических межсоединений для перспективных суперЭВМ повышенной производительности. Однако размещение волноводов в нескольких уровнях печатной платы предъявляет более жесткие требования к термической стабильности используемых полимеров. В частности, они должны выдерживать кратковременный нагрев до температур 200–230 °С в течение нескольких десятков минут и до температур 170–180 °С в течение нескольких часов без ухудшения оптических свойств. Такой диапазон температур диктуется требованиями современного технологического процесса производства многослойных печатных плат, который включает термическое спекание отдельных плат при повышенном

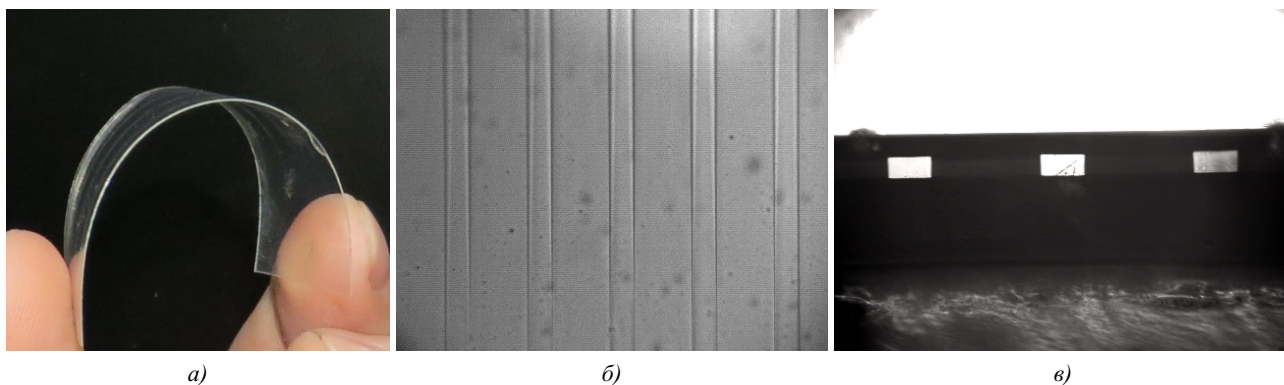


Рис. 5. Общий вид шлейфа на гибкой пластиковой подложке, включающего двенадцать полимерных волноводов (а). Фотография полимерных волноводов в шлейфе: вид сверху (б) и с торца (в)

давлении. Композиции на основе фторсодержащих акрилатов удовлетворяют требованиям по термической стойкости. Это обусловлено тем фундаментальным обстоятельством, что энергия разрыва связи С-Ф выше энергии разрыва связи С-Н. Поэтому полимеры, имеющие высокую степень фторирования, более устойчивы к повышенным температурам, чем их углеводородные аналоги.

Фотография изготовленных массивов полимерных волноводов, расположенных в двух слоях печатной платы, представлена рис. 6 [16, 17]. Ширина и высота волноводов составляют 40 и 30 мкм соответственно, расстояние между ними равно 120 мкм.

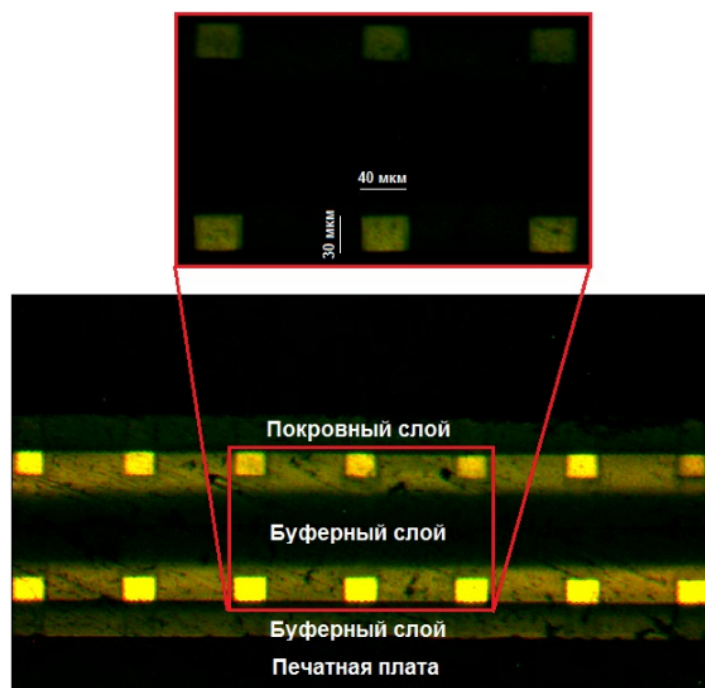


Рис. 6. Образец двухслойного массива полимерных волноводов, сформированных на печатной плате методом контактной УФ-фотолитографии (вид с торца)

4. Формирование оптических волноводов со скошенным торцом

В настоящее время в качестве источников и приемников излучения в оптической шине используются линейки полупроводниковых лазеров с вертикальным выводом излучения и матрицы фотоприемников, расположенные в плоскости печатной платы. Ввод излучения из лазеров в волноводы и вывод его из волноводов к фотоприемнику может быть осуществлен с использованием волноводов со скошенными под углом 45 градусов торцами. Это позволяет осуществить поворот луча на 90 градусов за счет эффекта полного внутреннего отражения, тем самым обеспечивая стыковку излучателей и фотоприемников с полимерными волноводами, см. рис. 7 [16, 17].



Рис. 7. (а) Схема волновода со скошенными под углом 45 градусов торцами для стыковки его с фотоприемниками (1) и излучателями (2). (б) Фотография изготовленного полимерного волновода со скошенным торцом

Создание оптической шины передачи данных на оптоэлектронной печатной плате для микропроцессорных вычислительных устройств

ИПЛИТ РАН совместно с НИИСИ РАН впервые в России изготовил макетный образец полимерной оптической шины на печатной плате FR4 для микропроцессорных вычислительных систем [16, 17]. Шина имеет 12 каналов передачи оптических сигналов со скоростями более 10 Гбит/с на канал. Фотография макетного образца оптоэлектронной платы с интегрированной в нее оптической шиной представлена на рис. 8а, а на рис. 8б дана фотография этого образца, помещенного в кейт компьютера. Суммарная скорость передачи оптических сигналов по изготовленной оптической шине превышает 120 Гбит/сек.

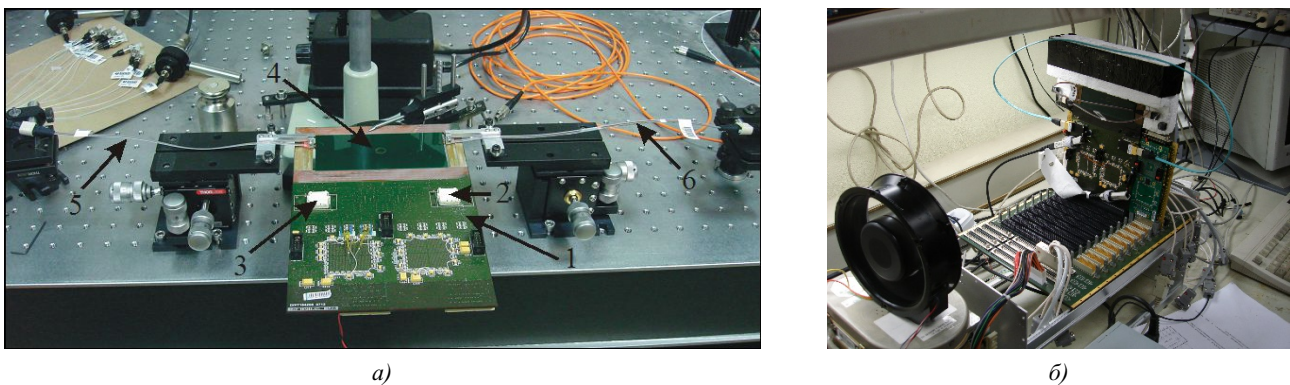


Рис. 8. Макетный образец полимерной оптоэлектронной печатной платы с интегрированной в нее полимерной оптической шиной на сборочном стенде (а) и в кейте компьютера (б). 1 — печатная плата FR4, 2 и 3 — BGA-разъемы для подключения трансиверов, 4 — массив из 12 полимерных волноводов, 5 и 6 — многожильные волоконно-оптические кабели

Заключение

В работе описан подход к созданию высокоскоростного оптического интерконнекта для супер-ЭВМ на основе «сквозных» оптических каналов, который предусматривает оптические межсоединения на кремниевом чипе (процессорном ядре) с использованием кремниевых волноводов, оптические межсоединения между процессорами на кросс-плате на основе фторполимерных волноводов, соединения между модулями в стойке и между стойками с помощью жгутов оптических волокон, состыкованных с полимерными волноводами на печатной плате.

Экспериментально продемонстрировано, что методом УФ-фотолитографии с использованием фторсодержащих акрилатов можно формировать базовые элементы оптического интерконнекта на печатной плате: массивы полимерных волноводов с плотностью упаковки более 500 шт/см, волноводы на гибких подложках, многослойные волноводные структуры, волноводы со скошенными торцами для стыковки с лазерами и фотоприемниками, расположенными в плоскости печатной платы.

Представлены характеристики макетного образца полимерной оптической шины на печатной плате FR4 для микропроцессорных вычислительных систем. Шина имеет 12 каналов передачи оптических сигналов со скоростями более 10 Гбит/с на канал. Суммарная скорость передачи оптических сигналов по изготовленной оптической шине превышает 120 Гбит/сек.

ЛИТЕРАТУРА

1. Zhou M. Low-Loss Polymeric Materials for Passive Waveguide Components in Fiber Optical Telecommunication. *Optical Engineering*. 2002;41(7):1631–1643.
2. Khanarian. G., Celanese H. Optical Properties of Cyclic Olefin Copolymers. *Optical Engineering*. 2001;40(6):1024–1029.
3. Eldada L., Shacklette L. W. Advances in Polymer Integrated Optic. *IEEE J. of Selected Topics in Quantum Electronics*. 2000;6(1):54–68.
4. Han K., Kim D. B., Jang W. H., Rhee T. H. Chloro-Fluorinated Polyimides for Low Loss Optical Waveguides Application. *Jpn. J. Appl. Phys.* 1999;38:L1249–L1251.
5. Erdogan T. Fiber Grating Spectra. *J. of Lightwave Technology*. 1997;15:1277–1294.
6. Sokolov V. I., Mishakov G. V., Panchenko V. Ya., Tsvetkov M. Yu. Routes to Polymer-Based Photonics. *Optical Memory and Neural Networks Information Optics*. 2007;16(2):67–74.
7. Sokolov V. I., Panchenko V. Ya., Seminogov V. N. Narrowband 1.5- μm Bragg Filter Based on a Polymer Waveguide with a Laser-Written Refractive-Index Grating. *Quantum Electronics*. 2010;40(8):739–742.
8. Ahn S. W., Steier W. H., Kuo Y. H. Integration of Electro-Optic Polymer Modulators with Low-Loss Fluorinated Polymer Waveguides. *Optics Letters*. 2002;27(23):2109–2111.
9. Groh W. Overtone Absorption in Macromolecules for Polymer Optical Fibers. *Macromol. Chem.* 1998;189:2861–2874.
10. Offrein B. J., Berger C., Beyeler R., Dangel R., Dellman L., Horst F., Lamprecht T., Meier N., Budd R., Libsch F., Kash J. Parallel Optical Interconnects in Printed Circuit Boards. *Proc. of SPIE*. 2005;5990:59900E1-59900E9.
11. Ахманов А. С., Наний О. Е., Панченко В. Я. Оптическая передача информации в супер - ЭВМ и микропроцессорных системах. *Lightwave (Russian edition)*. 2008;3:46–49.
12. Doany F. E., Show C. L., Baks C. W., Kuchta D. M., Pepeljugoski P., Schares L., Budd R., Libsch F., Dangel R., Horst F., Offrein B. J., Kash J. A. 160 Gb/s Bidirectional Polymer-Waveguide Board-Level Optical Interconnects Using CMOS-based Transceivers. *IEEE Transactions on advanced packaging*. 2009;32(2):345–359.
13. Igumnov S. M., Sokolov V. I., Men'shikov V. K., Mel'nik O. A., Boiko V. E., Dyachenko V. I., Nikitin L. N., Khaidukov E. V., Yurkov G. Yu., Buznik V. M. Fluorinated Monomers and Polymers with Specific Properties for Integrated Optics and Photonics. *Doklady Chemistry*. 2012;446, Part 1:183–187. DOI: 10.1134/S0012500812090066.
14. Соколов В. И., Ахманов А. С., Игумнов С. М., Людвигсен Х., Панченко В. Я., Савельев А. Г., Хайдуков Е. В., Хайдуков К. В. Формирование массивов фторполимерных волноводов, обладающих высокой степенью интеграции, на печатной плате. *Перспективные материалы*. 2013;S14:249–254.
15. IBM. Режим доступа: <http://www.ibm.com>.
16. Соколов В. И., Ахманов А. С., Игумнов С. М., Молчанова С. И., Савельев А. Г., Тютюнов А. А., Хайдуков Е. В., Хайдуков К. В., Панченко В. Я. Разработка элементной базы высокоскоростных интегрально-оптических устройств на основе новых полимерных материалов. *Вестник РФФИ*. 2014;3(83):78–87.
17. Хайдуков Е. В., Панченко В. Я., Хайдуков К. В., Соколов В. И., Ахманов А. С., Ашарчук И. М., Игумнов С. М., Молчанова С. И., Нечаев А. В., Савельев А. Г., Тютюнов А. А. Интегральная оптика на основе нанокompозитных полимерных материалов. *Вестник РФФИ*. 2015;4(88):68–79.

DOI: 10.51790/2712-9942-2021-2-2-3

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕЧЕНИЙ ПОЛИДИСПЕРСНЫХ ГАЗОКАПЕЛЬНЫХ СМЕСЕЙ С ХИМИЧЕСКИМ ПРЕВРАЩЕНИЯМИ

Н. Н. Смирнов^{1,2,a}, В. В. Тюренкова^{2,1,b}, Л. И. Стамов^{2,1,c}, Дж. Хадем³

¹ *Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, г. Москва, Российская Федерация*

² *Федеральное государственное учреждение «Федеральный научный центр Научно-исследовательский институт системных исследований Российской академии наук», г. Москва, Российская Федерация*

^a *ORCID: <http://orcid.org/0000-0001-6280-1522>, ebifsun1@mech.math.msu.su;*

^b *tyurenkova.v.v@yandex.ru; ^c ORCID: <http://orcid.org/0000-0001-8350-3137>, lyubens@mail.ru*

³ *Университет Бирджанда, Бирджанд, Южный Хорасан, Иран, jkhadem@birjand.ac.ir*

Аннотация: в статье представлен обзор результатов теоретических, численных и экспериментальных исследований процессов горения и инициирования детонации в гетерогенных полидисперсных смесях. Обсуждаются проблемы распыления, испарения и горения капель топлива, а также неравновесные эффекты при распылении капель и фазовых переходах. Влияние неоднородности размеров капель и неоднородности пространственного распределения на воспламенение смеси и ускорение пламени было исследовано для сильного и мягкого инициирования детонации: ударной волной и искровым зажиганием с последующим переходом от дефлаграции к детонации (ДДТ). Изучены особенности впрыска и зажигания струи в реакционной камере.

Ключевые слова: горение, аэрозоль, полидисперсная смесь, неравновесные эффекты, неоднородность.

Благодарности: авторы выражают благодарность за финансовую поддержку Российскому фонду фундаментальных исследований (грант № 20-03-00297).

Для цитирования: Смирнов Н. Н., Тюренкова В. В., Стамов Л. И., Хадем Дж. Вычислительное моделирование течений полидисперсных газокapельных смесей с химическим превращениями. *Успехи кибернетики*. 2021;2(2):29–41. DOI: 10.51790/2712-9942-2021-2-2-3.

SIMULATION OF POLYDISPERSE GAS-DROPLET MIXTURE FLOWS WITH CHEMICAL TRANSFORMATIONS

Nikolay N. Smirnov^{1,2,a}, Veronika V. Tyurenkova^{2,1,b}, Lyuben I. Stamov^{2,1,c}, Javad Khadem³

¹ *Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russian Federation*

² *Federal State Institution “Scientific Research Institute for System Analysis of the Russian Academy of Sciences”, Moscow, Russian Federation*

^a *ORCID: <http://orcid.org/0000-0001-6280-1522>, ebifsun1@mech.math.msu.su, mech.math.msu@inbox.ru;*

^b *tyurenkova.v.v@yandex.ru; ^c ORCID: <http://orcid.org/0000-0001-8350-3137>, lyubens@mail.ru*

³ *University of Birjand, Birjand, South Khorasan, Iran, jkhadem@birjand.ac.ir*

Abstract: the paper presents the results of theoretical, numerical and experimental investigations of combustion and detonation initiation in heterogeneous polydispersed mixtures. The problems of fuel droplets atomization, evaporation and combustion, and the non-equilibrium effects in droplets atomization and phase transitions are discussed. The effects of droplets size non-uniformity and spatial distribution non-uniformity on mixture ignition and flame acceleration were investigated for strong and mild initiation of detonation: by a shock wave and spark ignition followed by deflagration to detonation transition (DDT). The features of jet injection and ignition in a reaction chamber are studied.

Keywords: combustion, aerosol, polydisperse mixture, non-equilibrium effects, non-uniformity.

Acknowledgements: the reported study was funded by RFBR, project No. 20-03-00297.

Cite this article: Smirnov N. N., Tyurenkova V. V., Stamov L. I., Khadem J. Simulation of Polydisperse Gas-Droplet Mixture Flows with Chemical Transformations. *Russian Journal of Cybernetics*. 2021;2(2):29–41. DOI: 10.51790/2712-9942-2021-2-2-3.

Введение

Цель настоящего исследования — разработка, тестирование и верификация суперкомпьютерной модели для описания неравновесных волновых процессов в химически реагирующих многофазных средах и на ее основе исследования особенностей переходных процессов, а именно: установления детонационного режима, а также его расщепления на ударную волну и следующую за ней волну дефлаграции. Актуальность фундаментального исследования определяется необходимостью решения двух проблем противоположной направленности:

1. Проблема взрывобезопасности, которая заключается в организации эффективных превентивных мер, направленных на достижение двух целей: предотвращения перехода горения в детонацию в случае воспламенения горючей смеси, а также подавления детонационной волны в случае ее возникновения.

Знание методов управления этими переходными процессами необходимо при оценке воздействия на окружающую среду разрушения резервуаров с горючими компонентами и последующим воспламенением топливо-воздушной смеси и развитием взрыва.

2. Применение детонационного режима сжигания топливо-воздушных смесей может быть более эффективным для разработки двигателей нового поколения. Возможности по совершенствованию химических ракетных двигателей традиционных типов или турбореактивных двигателей практически полностью исчерпаны и ограничены незначительным улучшением энергомассовых характеристик.

Качественный скачок в развитии двигателестроения может быть достигнут путем разработки и внедрения принципиально новых типов двигателей. Перспективные направления исследований для создания новых типов двигателей — это использование быстрых режимов горения, а именно детонации. Преимущество данного режима заключается в значительной экономии горючего вследствие более высокой термодинамической эффективности детонационного горения и низкого выхода вредных веществ. Поскольку большинство горючих смесей являются многофазными, в которых горючее и окислитель находятся в разных фазах и предварительно не перемешаны, возрастает роль предсказательного вычислительного моделирования и управления процессами установления детонации в неоднородных многофазных химически реагирующих средах с учетом процессов турбулентного перемешивания.

В рамках проведенного исследования разработана суперкомпьютерная модель неравновесных волновых процессов в химически реагирующих многофазных смесях горючего и окислителя. Модель включает блок-модели неравновесных фазовых переходов конденсированных частиц в газовую фазу, турбулентного перемешивания и химических реакций, дробления каплей жидкой конденсированной фазы при взаимодействии с потоком несущей газообразной фазы, модели межфазного обмена энергией и импульсом. Проведено тестирование вычислительного кода на различных режимах работы в заданном диапазоне изменения определяющих параметров задачи. Выделены области изменения определяющих параметров, в которых код работает устойчиво и без сбоев. Верификация созданной вычислительной модели проведена на предмет адекватности нахождения решений определяющей системы дифференциальных уравнений. Валидация разработанной физической и математической моделей на предмет адекватности описания ими исследуемых физико-химических процессов проведена путем сравнения результатов модельных расчетов с экспериментальными данными. Произведена настройка параметров модели для получения удовлетворительного согласия расчетных и экспериментальных данных.

Математическая модель

Математические модели для моделирования турбулентных химически реагирующих течений в гетерогенных смесях подробно описаны в [1, 2]. Процессы горения в гетерогенных смесях сильно отличаются от процессов горения в гомогенных смесях, поскольку они регулируются не только химией, но и физическими процессами, такими как распыление капель [3, 4], испарение и диффузионное перемешивание паров горючего с окислителем.

В данных моделях используются как детерминированные методы механики многофазных течений для определения средних значений параметров газовой фазы, так и стохастические методы для описания эволюции полидисперсных частиц и флуктуаций параметров. Таким образом, можно оценить влияние хаотических пульсаций на скорость выделения энергии и средние значения параметров потока. Перенос кинетической энергии турбулентных пульсаций в то же время подчиняется детерминированным законам, являющимся макроскопической характеристикой.

Усредняя по Фавру с массой $\alpha\rho$ (α — объемная доля газовой фазы, ρ — плотность газа), мы получаем следующую систему для газовой фазы в многофазном потоке [5] (символы усреднения удалены для простоты):

$$\partial_t(\alpha\rho) + \nabla \cdot (\alpha\rho\vec{u}) = \dot{M}, \quad (1)$$

$$\partial_t(\alpha\rho Y_k) + \nabla \cdot (\alpha\rho Y_k\vec{u}) = -\nabla \cdot \vec{I}_k + \dot{M}_k + \dot{\omega}_k, \quad (2)$$

$$\partial_t(\alpha\rho\vec{u}) + \nabla \cdot (\alpha\rho\vec{u} \otimes \vec{u}) = \alpha\rho\vec{g} - \alpha\nabla p + \nabla \cdot \tau + \dot{\vec{K}}, \quad (3)$$

$$\partial_t(\alpha\rho E) + \nabla \cdot (\alpha\rho E\vec{u}) = \alpha\rho\vec{u} \cdot \vec{g} - \nabla \cdot p\vec{u} - \nabla \cdot \vec{I}_q + \nabla \cdot (\tau \cdot \vec{u}) + \dot{E}. \quad (4)$$

Уравнения (1–4) включают баланс массы в газовой фазе, баланс массы k -го компонента, баланс количества движения и баланс энергии соответственно. Здесь p — давление, $\vec{u}$ — вектор скорости жидкости, $\vec{g}$ — вектор ускорения свободного падения, E — удельная энергия, $\dot{\vec{K}}$ — удельный поток импульса в газовую фазу, $\dot{M}$ — удельный поток массы, $\dot{E}$ — удельный поток энергии, τ — тензор турбулентных напряжений, $\vec{I}_k$ — турбулентный диффузионный поток k -й компоненты. Также члены в уравнениях (1–2) связаны следующими соотношениями:

$$\sum_k Y_k = 1, \quad \sum_k \dot{M}_k = \dot{M}, \quad \sum_k \vec{I}_k = 0, \quad \sum_k \dot{\omega}_k = 0.$$

Используются следующие уравнения состояния газовой смеси:

$$p = R_g \rho T \sum_k Y_k / W_k,$$

$$E = \sum_k Y_k (c_{vk} T + h_{0k}) + \frac{\vec{u}^2}{2} + k, \quad (5)$$

где E — энергия газа, k — турбулентная кинетическая энергия, W_k — молярная масса k -го компонента газа, h_{0k} — удельная химическая энергия, c_{vk} — удельная теплоемкость, Y_k — массовая концентрация k -го компонента газа, T — температура газа, R_g — универсальная газовая постоянная. Член, отвечающий за химические превращения, $\dot{\omega}_k$ очень чувствителен к изменениям температуры, поскольку обычно выражается функцией типа закона Аррениуса для скоростей реакций. Чтобы учесть изменения температуры, исходный член $\dot{\omega}_k$ в уравнениях (2) был смоделирован с использованием квадратурной формулы Гаусса.

Рассмотрим температуру как стохастическую функцию T со средним $\bar{T}$ и среднеквадратичными отклонениями $\theta = \overline{T'T'}$. Тогда среднее значение функции, имеющей T в качестве независимой переменной, может быть определено следующим образом:

$$\overline{f(T)} = \int f(\bar{T} + \zeta\sqrt{\theta}) P_d(\zeta) d\zeta,$$

где ζ — случайное значение с нулевым математическим ожиданием и единичным отклонением, а его плотность вероятности равна $P_d(\zeta)$. Для оценки интеграла используется минимальное количество слагаемых (а именно три), и $P_d(\zeta)$ предполагается четным. В этом случае формула для усреднения $f(T)$ имеет следующий вид:

$$\overline{f(T)} = \frac{1}{2\chi^2} f(\bar{T} - \chi\sqrt{\theta}) + \left(1 - \frac{1}{\chi^2}\right) f(\bar{T}) + \frac{1}{2\chi^2} f(\bar{T} + \chi\sqrt{\theta}).$$

В случае нормального (гауссовского) отклонения значение χ равно $\sqrt{3}$ (случай Гаусса–Эрмита). Следовательно, приведенная выше формула может быть преобразована следующим образом:

$$\overline{f(T)} = \frac{1}{6} f(\bar{T} - \sqrt{3\theta}) + \frac{2}{3} f(\bar{T}) + \frac{1}{6} f(\bar{T} + \sqrt{3\theta}).$$

В нашем случае функция $f(T)$ зависит от температуры по закону Аррениуса, а все средние значения для $\dot{\omega}_k$ являются комбинацией этих зависимостей. В законе Аррениуса для $\dot{\omega}_k$ использовались

усредненные величины массовых долей и плотности, поскольку зависимость от этих функций не такая сильная, как зависимость от температуры.

Турбулентный тепловой поток $\vec{I}_q$ в уравнении (4) складывается из двух слагаемых:

$$\vec{I}_q = \vec{J}_q + \sum_k (c_{pk}T + h_{0k})\vec{I}_k, \quad (6)$$

где $\vec{J}_q$ можно интерпретировать как турбулентный теплопроводный поток тепла. Вихревая кинематическая вязкость ν^t выражается в соответствии с моделью к-эпсилон как $\nu^t = C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon}$. Турбулентные потоки имеют следующий вид:

$$\tau = \alpha(\mu + \rho\nu^t)(\nabla\vec{u} + \nabla\vec{u}^T - (2/3)(\nabla \cdot \vec{u})U) - (2/3)\alpha\rho kU, \quad (7)$$

$$\vec{I}_k = -\alpha\rho(D + (\nu^t/\sigma_d))\nabla Y_k, \quad (8)$$

$$\vec{J}_q = -\alpha(\lambda + \sum_k c_{pk}\rho(\nu^t/\sigma_t))\nabla T. \quad (9)$$

Модель замыкается уравнениями для k , θ и ε :

$$\partial_t(\alpha\rho k) + \nabla \cdot (\alpha\rho\vec{u}k) = \nabla \cdot (\alpha(\mu + \rho(\nu^t/\sigma_k))\nabla k) + \tau^t : \nabla\vec{u} - \alpha\rho\varepsilon, \quad (10)$$

$$\partial_t(\alpha\rho\varepsilon) + \nabla \cdot (\alpha\rho\vec{u}\varepsilon) = \nabla \cdot (\alpha(\mu + \rho(\nu^t/\sigma_\varepsilon))\nabla\varepsilon) + (\varepsilon/k)(C_{1\varepsilon}\tau^t : \nabla\vec{u} - C_{2\varepsilon}\alpha\rho\varepsilon), \quad (11)$$

$$\partial_t(\alpha\rho\theta) + \nabla \cdot (\alpha\rho\vec{u}\theta) = \nabla \cdot (\alpha(\mu + \sum_k c_{pk}\rho(\nu^t/\sigma_k))\nabla\theta) + P_\theta + W_\theta - D_\theta, \quad (12)$$

где производство P_θ , W_θ и диссипация D_θ определяются следующими соотношениями:

$$P_\theta = 2\alpha\rho\tilde{c}_p \frac{\nu_t}{\sigma_k} |\nabla T|^2, \quad W_\theta = -\sum_k \overline{\omega_k T'} h_{0k}, \quad D_\theta = C_g\alpha\rho \sum_k c_{pk} \frac{\varepsilon}{k} \frac{\theta}{\theta_m - \theta}. \quad (13)$$

Константы принимают следующие значения [5]:

$$\begin{aligned} C_\mu &= 0.09, & C_{1\varepsilon} &= 1.45, & C_{2\varepsilon} &= 1.92, & \sigma_d &= 1, & \sigma_t &= 0.9, \\ \sigma_k &= 1, & \sigma_\varepsilon &= 1.13, & \theta_m &= \bar{T}^2/4, & C_g &= 2.8. \end{aligned}$$

Видно, что уравнения (10–12) не содержат членов, ответственных за вклад той или иной фазы в рост энергии турбулентности. Это связано с прямым стохастическим моделированием дисперсной фазы: влияние последней на газовую фазу приводит к стохастическому поведению членов источника импульса $\dot{\vec{K}}$. Эти члены влияют на усредненную скорость газовой фазы стохастическим образом и, следовательно, также влияют на исходный член $\tau^t : \nabla\vec{u}$. Движение полидисперсных каплей (частиц) моделируется с использованием стохастического подхода. Выделяется группа типичных модельных частиц. Движение этих частиц моделируется непосредственно с учетом влияния среднего потока газа и пульсаций параметров в газовой фазе. Подробно процедура описана в работах [1, 2, 5].

Неравновесные эффекты газокapельного взаимодействия для испаряющихся каплей и для горящих каплей учитывались на основе взаимодействия одиночной капли топлива с нагретым потоком окислителя [6–8]. Эффективность численной схемы представляла собой линейную функцию: время расчета прямо пропорционально увеличению ячеек в газовой фазе и количеству каплей модели.

Движение полидисперсных каплей моделируется с использованием стохастического подхода. Выделяется группа типичных модельных каплей, каждая из которых представляет собой ряд реальных каплей. Движение этих каплей моделируется непосредственно с учетом влияния среднего потока газа и пульсаций параметров в газовой фазе [1, 2], а также испарения и распыления. Таким образом, большое количество реальных каплей (капель жидкости) моделировалось ансамблем модельных каплей. Каждая модельная частица характеризовалась вектором значений, представляющим ее местоположение, скорость, массу, количество реальных каплей, представленных данной моделью, и другие

свойства. Приведено минимальное среднее количество капель модели на узел сетки, что гарантирует достаточную точность оценки потоков между фазами.

$$m \frac{d\vec{u}}{dt} = m\vec{g} - \phi \cdot \nabla p + \vec{f}_d, \quad \frac{d\vec{r}}{dt} = \vec{u}, \quad \vec{f}_d = \frac{C_d}{2} \rho_g \frac{\pi d^2}{4} (\vec{v} - \vec{u}) |\vec{v} - \vec{u}|, \quad (14)$$

Коэффициент лобового сопротивления является функцией числа Рейнольдса:

$$C_d = \left(\frac{24}{Re} + \frac{4,4}{\sqrt{Re}} + 0,42 \right) \beta \cdot K, \quad Re = \frac{\rho |\vec{v} - \vec{u}| d}{\mu}, \quad \beta = \sqrt{\frac{\rho}{\rho_s} \left(2 - \frac{\rho}{\rho_s} \right)}, \quad K = \left(\frac{T}{T_s} \right)^{4/5},$$

$$\frac{\rho_s}{\rho} = \begin{cases} \left(1 + \frac{\gamma-1}{2} M^2 \right)^{1/(\gamma-1)}, & M < 1, \\ \frac{(\gamma+1)M^2}{(\gamma-1)M^2+2} \left(1 + \frac{\gamma-1}{2} \cdot \frac{(\gamma-1)M^2+2}{2\gamma M^2 - (\gamma-1)} \right)^{1/(\gamma-1)}, & M \geq 1. \end{cases} \quad (15)$$

Уравнение энергии капли имеет следующий вид [2, 5]:

$$m \frac{de}{dt} = q + Q_s, \quad \text{где} \quad e = c_{vs} T_s + h_f^0, \quad Q_s = \frac{dm}{dt} h_L; \quad (16)$$

где h_L — скрытая теплота испарения, Q_s — энергия фазовых переходов. Тепловой поток к одиночной капле от окружающего газового потока определяется следующим образом [6]:

$$q = \begin{cases} \pi d \lambda \cdot Nu \cdot (T - T_s), & Re < 1000, \\ \pi d^2 \rho |\vec{v} - \vec{u}| \cdot St \cdot (H_r - H_w), & Re \geq 1000, \end{cases} \quad Nu = 2 + 0,16 \cdot Re^{2/3} \cdot Pr^{1/3}, \quad St = \frac{C_d}{2} \frac{-2/3}{Pr}. \quad (17)$$

Модель неравновесного испарения используется для определения скорости испарения [2]:

$$\dot{m} = \pi d \cdot \rho D \cdot Nu \cdot \log \left(\frac{1 - Y_e}{1 - Y_w} \right), \quad Y_w = \frac{W_N P_0}{W_p} \exp \left[\frac{H_b}{R} \left(\frac{1}{T_b(P_0)} - \frac{1}{T_s} \right) \right] - \dot{m} \frac{\sqrt{2\pi R T_s}}{\pi \delta_e p d^2}.$$

Динамическое взаимодействие жидких капель с газовым потоком могло привести к неустойчивости границы раздела в сдвиговом потоке и распылению капель. Критерием неустойчивости жидких капель является критическое число Вебера [4, 7]: $We = \frac{\rho v_{rel}^2 d}{\sigma}$, где σ — поверхностное натяжение на границе раздела, v_{rel} — относительная скорость капли относительно газа.

При превышении критического значения числа Вебера происходит распад капель из-за колебательной неустойчивости. При значительном превышении критического числа Вебера другие механизмы начинают играть существенную роль в процессе разрушения, приводящего к образованию мелко-дисперсного тумана [2, 4, 6]. Эти основные характеристики процесса распыления могут быть учтены следующей приближенной формулой [2], определяющей средние диаметры капель d_a , образующихся при распылении исходных капель (диаметр d):

$$d_a = \begin{cases} d = \left(\frac{6\alpha_2}{\pi n} \right)^{1/3}, & We < We_*, \\ \frac{d We_*}{We}, & We_* \leq We \leq We_{**}, \quad We_* = 12(1 + Lp^{-0.8}), \quad We_{**} = 350, \\ d_*, & We > We_{**}, \end{cases}$$

где n — количество капель на единицу объема, α_2 — объемная доля фазы капли, We_* — критическое число Вебера, $Lp = \frac{d \rho_c \sigma}{\mu_c^2}$ — число Лапласа, ρ_c , μ_c — плотность и вязкость жидкости.

Коалесценций капель из-за столкновений пренебрегают. Это предположение справедливо для разреженных смесей. В настоящем моделировании мы будем изучать смеси, в которых объемная доля жидкости составляет 10^{-3} , что обеспечивает вероятность столкновения 10^{-6} .

Результаты численных исследований

Используя модель динамики одиночной капли, мы моделировали взаимодействие сильной ударной волны в воздухе с аэрозолем, состоящим из капelь топлива. Капли аэрозоля имеют небольшой размер и сферическую форму. Исходное состояние аэрозоля полидисперсное, то есть можно рассматривать одновременное существование капelь разного начального диаметра [4, 5].

При изучении взаимодействия ударной волны с аэрозолем последовательно рассматривается следующая иерархия моделей:

- 1) с учетом только силы сопротивления;
- 2) с учетом силы сопротивления и теплообмена;
- 3) с учетом сопротивления, теплопередачи и испарения;
- 4) с учетом силы сопротивления, теплопередачи, испарения и распыления капelь;
- 5) с учетом сопротивления, теплопередачи, испарения, распыления капelь и горения.

Проведено численное моделирование двумерного течения в цилиндрической трубе. Труба состоит из двух частей. Давление и температура на левой стороне $x \leq b$ повышены ($P_1 = 10 \div 100$ бар, $T_1 = 1500$ К) по сравнению с условиями в правой части ($P_0 = 1$ бар, $T_0 = 300$ К). Левая часть заполнена воздухом, правая часть при $b < x < x_0$ также заполнена воздухом, а при $x \geq x_0$ добавлен аэрозоль (рис. 1). Длина трубки $L = 2$ м, диаметр $D = 8$ см. Плотность аэрозоля $0,8 \text{ кг/м}^3$, что соответствует объемной концентрации 10^{-3} .

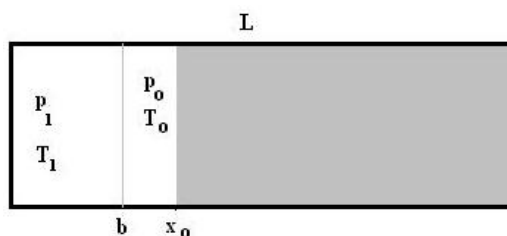


Рис. 1. Схематическое изображение постановки задачи

На рис. 2–6 представлены графики скорости ударной волны вдоль оси трубы для различных значений начальных отношений давлений P_1/P_0 . Разные кривые с номерами от 1 до 5 соответствуют разным моделям газокapельного взаимодействия, описанным выше.

На рис. 2 представлены результаты для начального перепада давлений $P_1/P_0=10$. Видно, что при попадании ударной волны в область, заполненную аэрозолем, скорость волны уменьшается. Наиболее интенсивное снижение скорости происходит при учете только сопротивления и теплопередачи (кривая 2), наименее интенсивное снижение скорости волны — при учете только сопротивления (кривая 1). Другие, более сложные модели соответствуют промежуточным результатам. Учет испарения приводит к меньшему снижению скорости ударной волны по сравнению с учетом только тепловых и механических потерь. Причина в следующем: испарение приводит к образованию за ударной волной дополнительного объема газа, который поддерживает ее распространение (кривая 3).

С увеличением начальной интенсивности ударной волны ($P_1/P_0=25$, рис. 3) наибольшее уменьшение ее интенсивности также происходит при учете сопротивления и теплообмена (кривая 2), а наименьшее — при учете сопротивления, теплообмена и испарения (кривая 3). Это связано с тем, что интенсивность испарения капelь увеличивает объем газа. Учет распыления капelь приводит к более быстрому уменьшению скорости ударной волны по сравнению с учетом термомеханического взаимодействия и испарения (кривая 4). Объяснение этого факта следующее: распыление капelь приводит к образованию новой свободной поверхности, что увеличивает обмен импульсом и энергией между газом и конденсированной фазой; мелкие капелючки замедляются и нагреваются намного быстрее, тем самым увеличивая потери импульса и энергии в потоке газа, что приводит к замедлению ударной волны. С учетом горения (кривая 5) около правого конца трубы скорость волны увеличивается до $1500\text{--}1700 \text{ м/с}$, что соответствует воспламенению газовой смеси и переходу горения в детонационный режим.

На рис. 4 результаты соответствуют интенсивности ударной волны $P_1/P_0=50$. Общий характер уменьшения интенсивности ударной волны в области, заполненной аэрозолем, остается аналогичным

предыдущим результатам, но с учетом горения (кривая 5) переход к детонации возникает на расстоянии 1,2–1,5 м от источника. Происходит очистка трубы; после этого интенсивность волны немного уменьшается. Такое поведение можно интерпретировать как переход от горения к детонации через перегруженный режим с последовательным замедлением до самоподдерживающейся стационарной скорости.

Рис. 5 соответствует начальному перепаду давлений $P_1/P_0=75$, а рис. 6 соответствует начальному перепаду давлений $P_1/P_0=100$. Из этих рисунков можно увидеть характер уменьшения интенсивности начальной ударной волны для моделей взаимодействия различной сложности. С учетом горения (кривая 5) ускорение горения и переход к детонации происходит на 1,2–1,3 м ($P_1/P_0=75$) — на 0,7–1,1 м ($P_1/P_0=100$). На рис. 6 показано, что детонация распространяется в перегруженном режиме (сильная детонация) на высоте 1,2–1,3 м, а затем замедляется до стационарного режима (детонация Чепмена–Жуге).

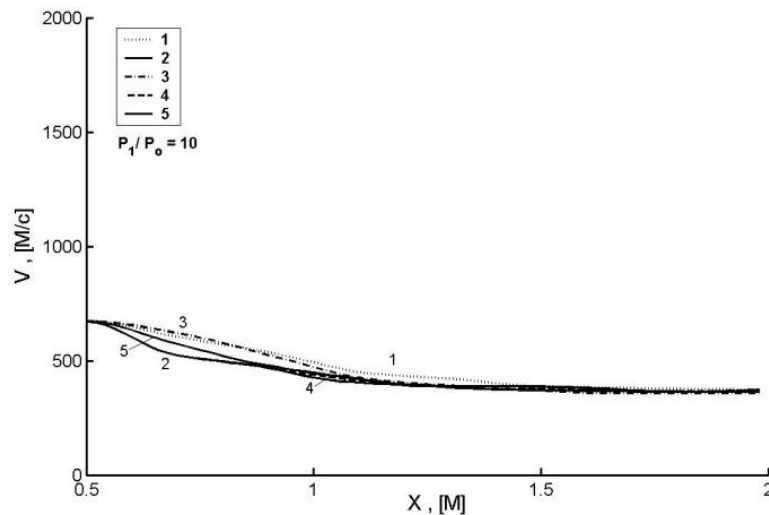


Рис. 2. Эволюция скорости ударной волны вдоль оси трубы при входе в дисперсную смесь для различных моделей газокапельного взаимодействия. $P_1/P_0=10$

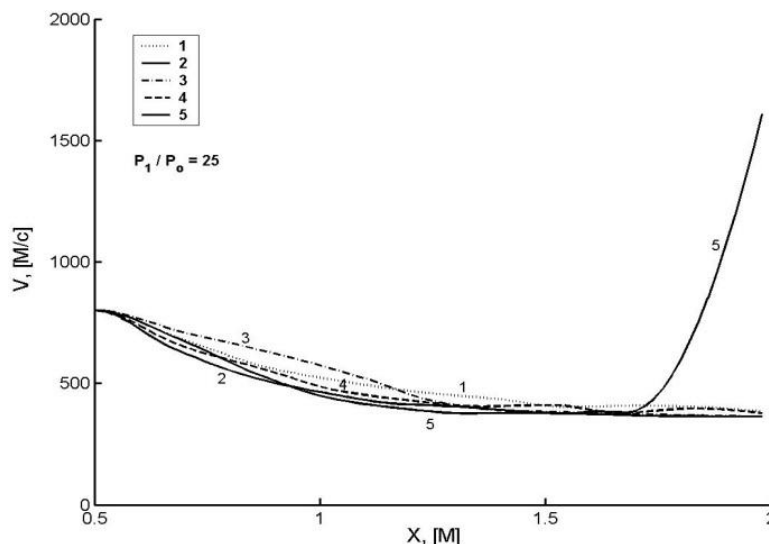


Рис. 3. Эволюция скорости ударной волны вдоль оси трубы при входе в дисперсную смесь для различных моделей газокапельного взаимодействия. $P_1/P_0=25$

Рис. 8–12 показано распределение температуры и поля давления капли вдоль трубы для начального отношения давлений $P_1/P_0=75$ в последовательные моменты времени. Температура (а также распределение и размер) частиц изображены с помощью кружков в месте расположения каждой модельной частицы. Размер каждого кружка соответствует размеру капли, а цвет соответствует темпера-

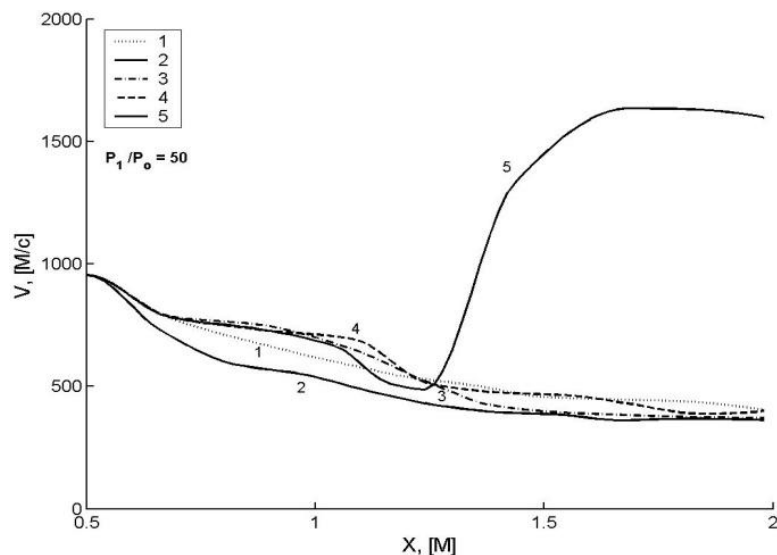


Рис. 4. Эволюция скорости ударной волны вдоль оси трубы при входе в дисперсную смесь для различных моделей газокapельного взаимодействия. $P_1/P_0=50$

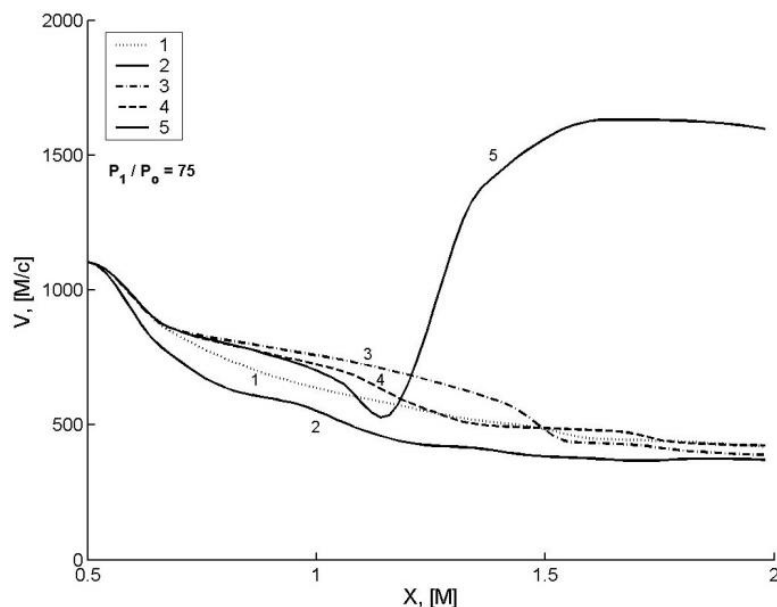


Рис. 5. Эволюция скорости ударной волны вдоль оси трубы при входе в дисперсную смесь для различных моделей газокapельного взаимодействия. $P_1/P_0=75$

туре. Размер модельных частиц пропорционально увеличен для лучшей видимости [4].

На рис. 8 показаны результаты, полученные при взаимодействии ударной волны с аэрозолем, с учетом только силы сопротивления (т. е. обмена импульсом). Видно, что со временем около оси трубы происходит разрежение аэрозоля, масса которого в целом остается неизменной. Это связано с тем, что вблизи оси трубы скорость газа за волной выше, чем у ее стенок, и частицы, уносимые волной, перемещаются на большее расстояние от своего первоначального местоположения. Некоторые частицы движутся влево против направления ударной волны. Это может быть связано с их взаимодействием со вторичными волнами, образованными в результате взаимодействия первичной волны с аэрозолем.

На рис. 9 показаны результаты, полученные при учете силы сопротивления и теплообмена (т. е. межфазного обмена импульсом и тепловой энергией). Из этого рисунка видно, что температура капель, взаимодействующих с ударной волной, увеличивается. Распределение частиц по трубе близко к изображенному на рис. 8.

На рис. 10 показаны результаты, полученные при учете испарения. Из этого рисунка видно, что капли практически по всему сечению трубы быстро испаряются после относительно короткой стадии

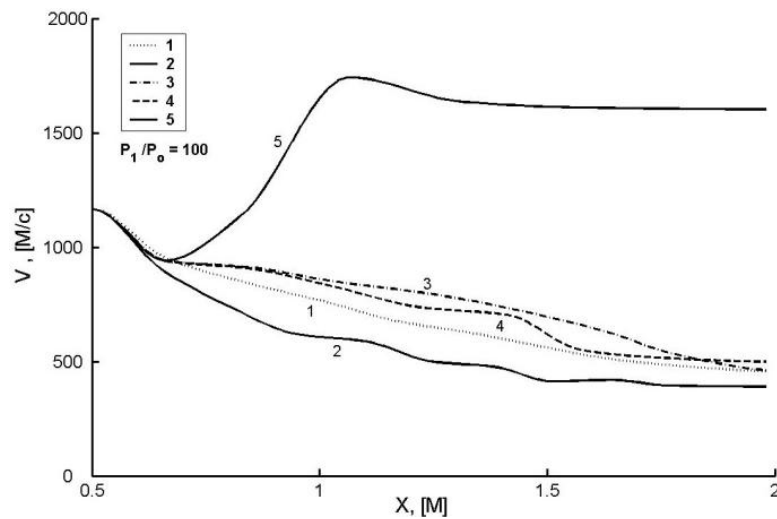


Рис. 6. Эволюция скорости ударной волны вдоль оси трубы при входе в дисперсную смесь для различных моделей газокapельного взаимодействия. $P_1/P_0=100$

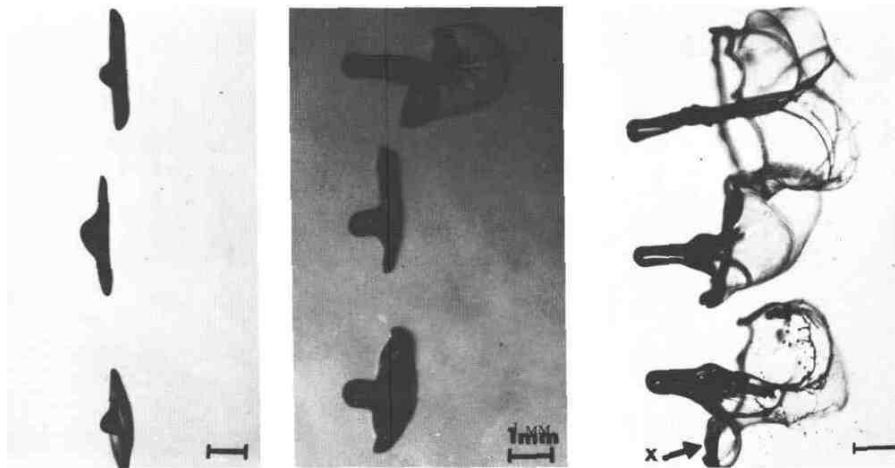


Рис. 7. Пример взаимодействия ударной волны с каплей

повышения температуры. Этот этап удлиняется по мере того, как ударная волна проникает глубже от начала трубы из-за уменьшения интенсивности ударной волны и, соответственно, скорости газа за ней. Частицы у стенки испаряются намного медленнее из-за низкой относительной скорости газа (из-за условия прилипания скорости газа к стенкам трубы). В дальнейшем эти частицы удаляются от стенок и тем самым создают слабую концентрацию неиспарившейся дисперсной фазы далеко за начальной ударной волной.

На рис. 11 показаны результаты, полученные при учете распыления капель. Эти результаты аналогичны предыдущим (рис. 10, с учетом испарения, потоков тепла и импульса, без учета распыления капель), за исключением того факта, что испарение мелких капель после распыления становится намного более интенсивным. На последней стадии, когда ударная волна глубоко проникла в дисперсную смесь, шлейф взаимодействующих с ней частиц, но не испаряющихся, увеличивается за счет ослабления интенсивности ударной волны и, как следствие, уменьшения теплового потока к каплям от менее нагретого газа. Этот эффект аналогичен тому, который проявляется в случае испарения без учета распыления. Капли, примыкавшие к стенкам в момент взаимодействия с ударной волной, практически не распадаются и ведут себя так же, как и в случае без учета распыления (рис. 10).

При горении в газовой фазе учитывается (рис. 12), что фронт испарения частиц и фронт горения очень близки друг к другу; их форма практически совпадает с поперечным сечением трубки. Это связано со значительным увеличением относительной скорости газа за волной в режиме детонации.

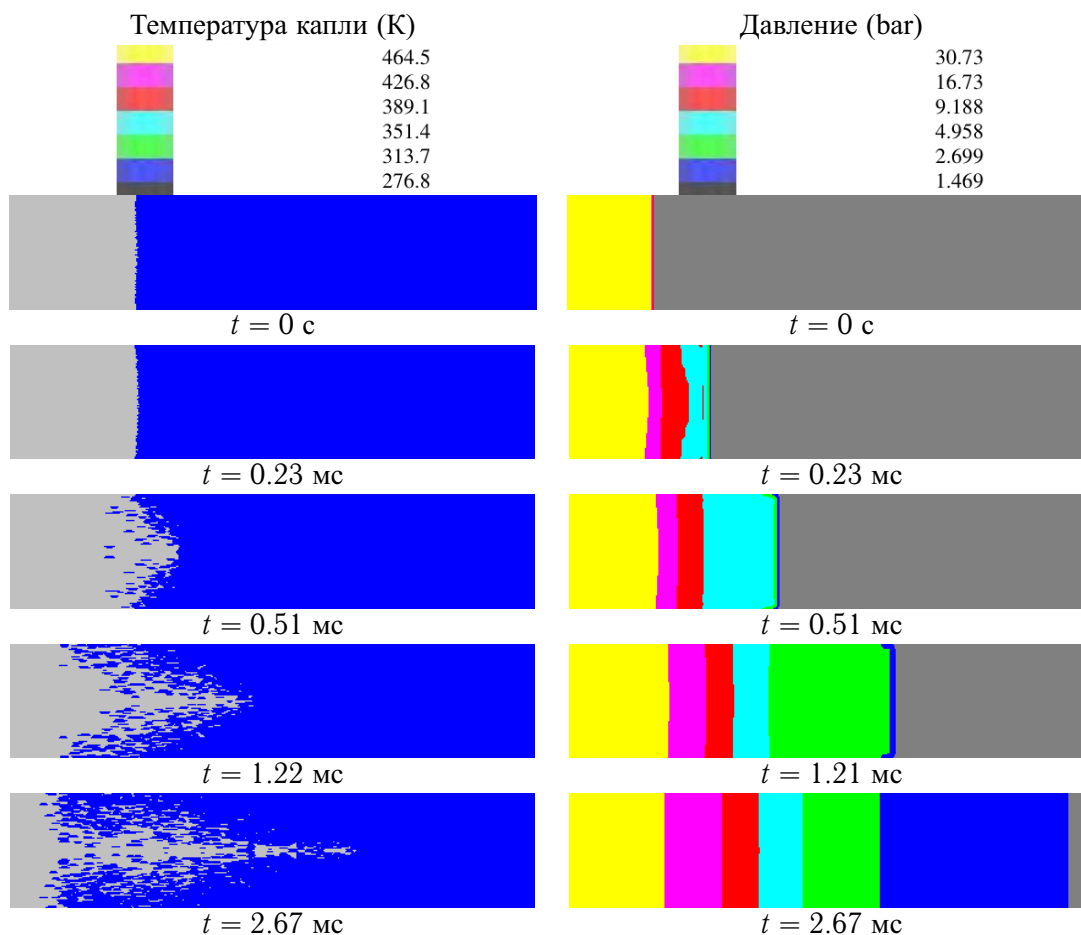


Рис. 8. Учитывается только эволюция полей температуры (слева) и давления газа (справа) модельной капли при условии силы сопротивления. Начальная степень сжатия $P_1/P_0=75$

Выводы

Исследование различных моделей газок капельного взаимодействия позволило оценить роль различных эффектов в поведении ударной волны: механических потерь, тепловых потерь, испарения капель, распыления, воспламенения и горения паров топлива.

Показано, что при попадании ударной волны в область, заполненную аэрозолем, скорость волны уменьшается. Наиболее интенсивное снижение скорости происходит при учете только сопротивления и теплопередачи, наименее интенсивное снижение скорости волны – при учете только сопротивления.

Учет испарения приводит к меньшему снижению скорости ударной волны по сравнению с учетом только тепловых и механических потерь. Причина в следующем: испарение приводит к образованию за ударной волной дополнительного объема газа, который поддерживает ее распространение.

Учет распыления капель приводит к более быстрому уменьшению скорости ударной волны по сравнению с учетом термомеханического взаимодействия и испарения. Объяснение этого факта следующее: распыление капель приводит к образованию новой свободной поверхности, что увеличивает обмен импульсом и энергией между газом и конденсированной фазой; мелкие капельки замедляются и нагреваются намного быстрее, тем самым увеличивая потери импульса и энергии в потоке газа, что приводит к замедлению ударной волны.

С учетом горения после некоторого периода торможения в аэрозоле скорость ударной волны увеличивается до 1500-1700 м/с, что соответствует воспламенению газовой смеси и переходу горения в режим детонации.

Переход от горения к детонации происходит в режиме с перегрузкой (режим сильной детонации, характеризующийся повышенной скоростью и давлением) с последовательным замедлением до самоподдерживающейся стационарной скорости режима Чепмена–Жуге.

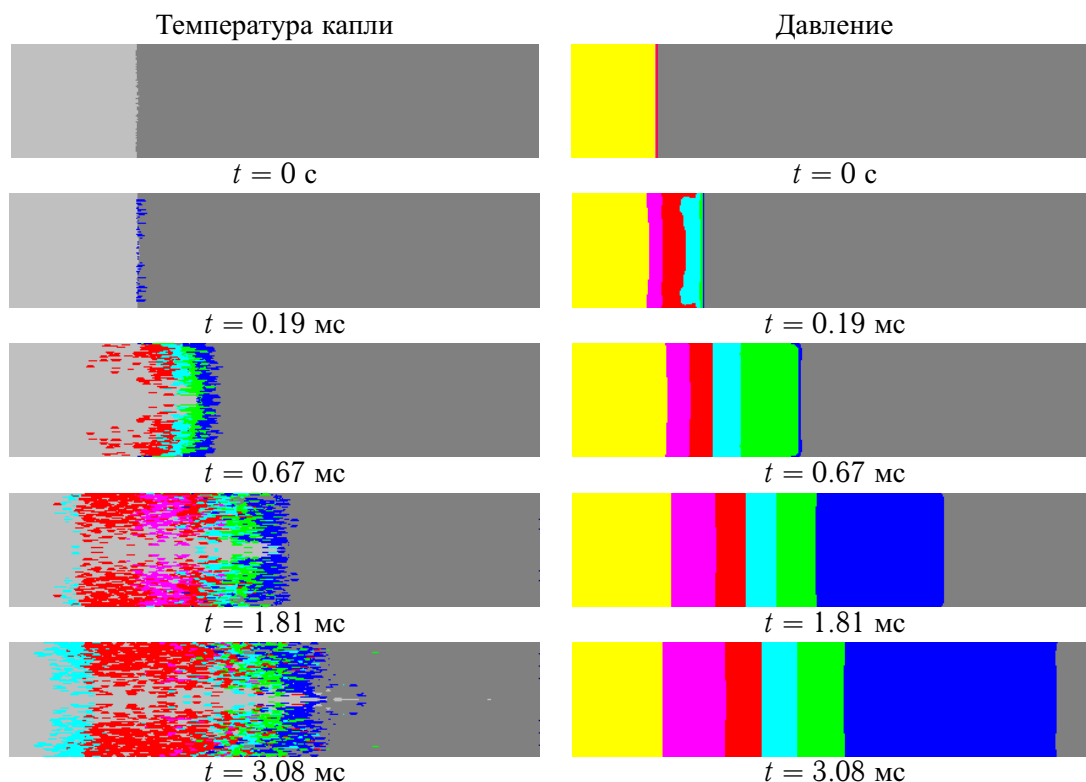


Рис. 9. Учитывается эволюция полей температуры модели капли (слева) и давления газа (справа) при условии силы сопротивления и теплообмена. Начальная степень сжатия $P_1/P_0=75$

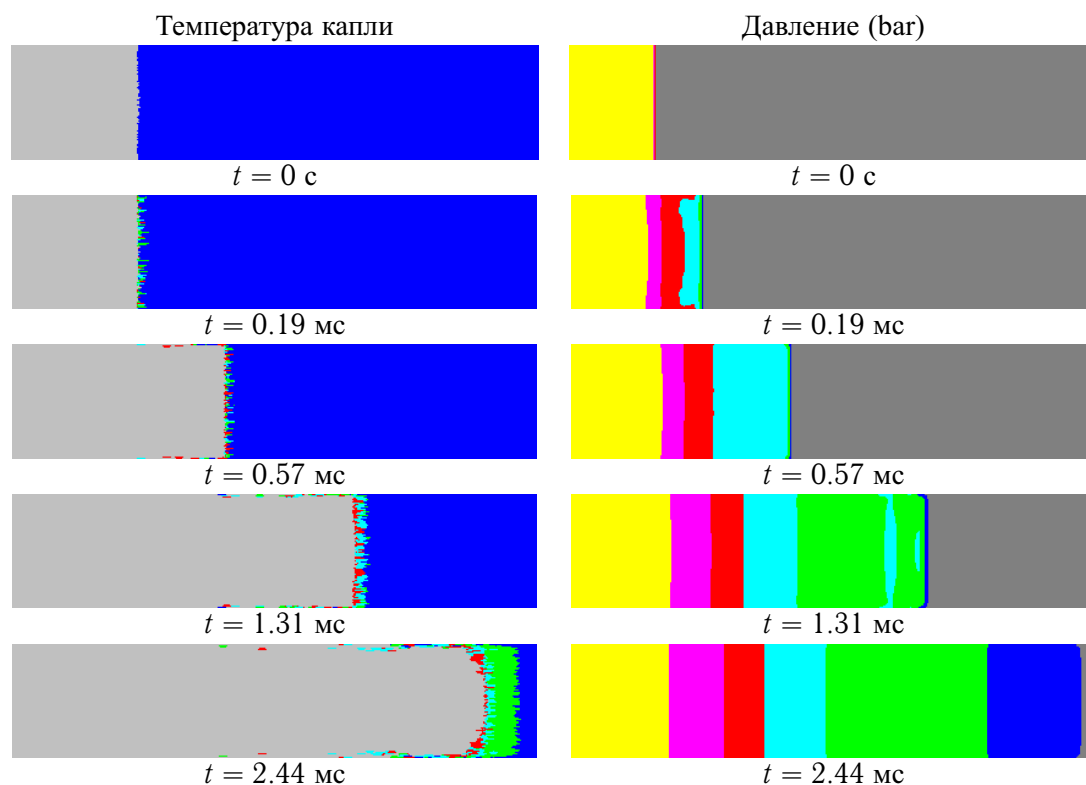


Рис. 10. Эволюция полей температуры (слева) и давления газа (справа) модели при условии учета импульса, теплового и массообмена (испарения) между каплями и газовой фазой. Начальная степень сжатия $P_1/P_0=75$

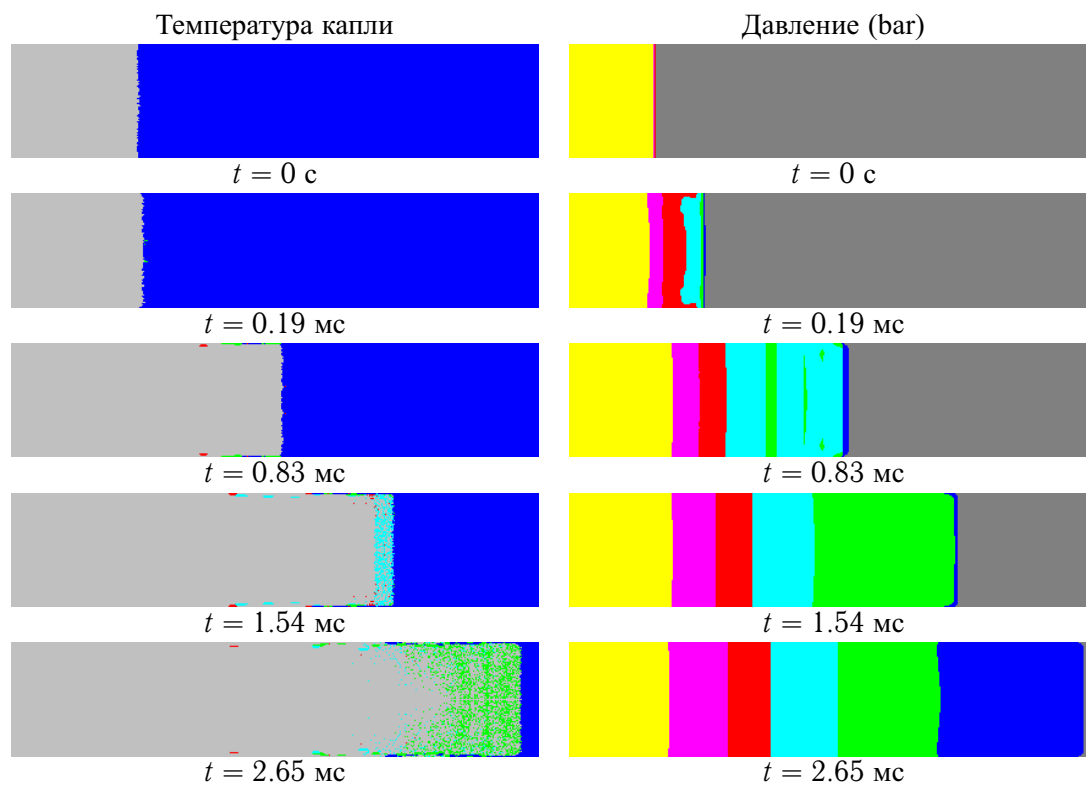


Рис. 11. Эволюция полей температуры капли (слева) и давления газа (справа) при условии учета распыления капель, количества движения, теплового и массообмена (испарения) между каплями и газовой фазой. Начальная степень сжатия $P_1/P_0=75$

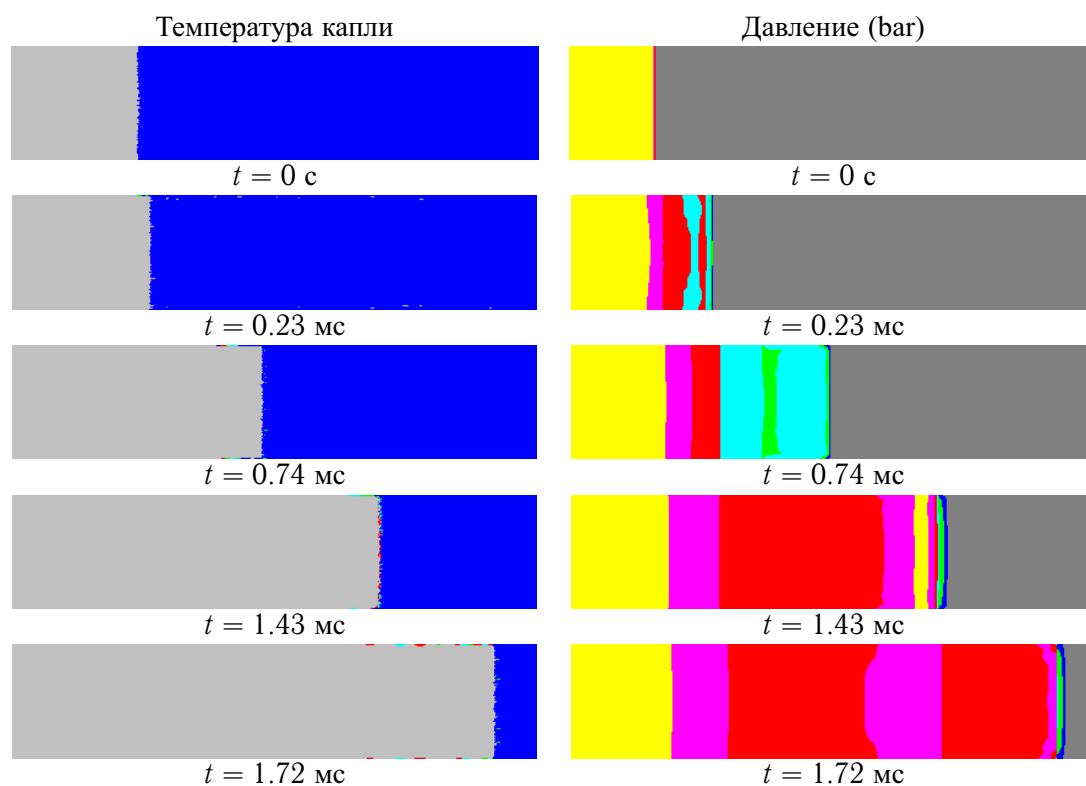


Рис. 12. Эволюция полей температуры капли (слева) и давления газа (справа) при условии учета распыления капель, импульса, теплового и массообмена (испарения) между каплями и газовой фазой, воспламенения и горения пара капли. Начальная степень сжатия $P_1/P_0=75$

ЛИТЕРАТУРА

1. Smirnov N. N., Nikitin V. F., Legros J. C. Ignition and Combustion of Turbulized Dust – Air Mixtures. *Combust. Flame*. 2000;123(1/2):46–67. DOI: 10.1016/S0010-2180(00)00147-4.
2. Smirnov N. N., Nikitin V. F., Khadem J., Aliari Shourekhdeli Sh. Onset of Detonation in Polydispersed Fuel-Air Mixtures. *Proceedings of the Combustion Institute*. 2007;31:832-841. DOI: 10.1016/j.proci.2006.07.018.
3. Smirnov N. N. Combustion and Detonation in Multiphase Media. Initiation of Detonation in Dispersed-Film Systems behind a Shock Wave. *Int. J. Heat Mass Transfer*. 1988;31(4):779–793. DOI: 10.1016/0017-9310(88)90135-4.
4. Khadem J. Ignition, Combustion and Detonation in Poly-Dispersed Fuel – Air Mixtures. Dissertation. Moscow M. V. Lomonosov State University. 2005.
5. Betelin V. B., Smirnov N. N., Dushin V. R., Nikitin V. F., Kushnirenko A. G., Nerchenko V. A. Evaporation and Ignition of Droplets in Combustion Chambers Modeling and Simulation. *Acta Astronautica*. 2012;70:23–35. DOI: 10.1016/j.actaastro.2011.06.021.
6. Dushin V. R., Kulchitskiy A. V., Nerchenko V. A., Nikitin V. F., Osadchaya E. S., Phylippov Yu. G., Smirnov N. N. Mathematical Simulation for Non-Equilibrium Droplet Evaporation. *Acta Astronautica*. 2008;63:1360-1371. DOI: 10.1016/j.actaastro.2008.05.021.
7. Tyurenkova V. V. Non-Equilibrium Diffusion Combustion of a Fuel Droplet. *Acta Astronautica*. 2012;75:78-84. DOI: 10.1016/j.actaastro.2012.01.010.
8. Tyurenkova V. V., Smirnova M. N., Nikitin V. F. Two-Phase Fuel Droplet Burning in Weightlessness. *Acta Astronautica*. 2020;176: 672-681. DOI: 10.1016/j.actaastro.2020.03.044.

DOI: 10.51790/2712-9942-2021-2-2-4

ON EULER AND CHEBYSHEV, AT THE FOUNDATION OF RUSSIAN MATHEMATICS

Athanasios Papadopoulos

*University of Strasbourg, The French National Centre for Scientific Research, Strasbourg, France,
 papadop@math.unistra.fr*

Abstract: on the occasion of Chebyshev's two-hundredth anniversary, I review part of his work, showing that in several respects he was the heir of Euler. In doing this, I consider the works of Euler and Chebyshev on three topics in applied science: industrial machines, ballistics and geography, and then on three topics in pure mathematics: integration, continued fractions and number theory, showing that in each field the two mathematicians were interested in the same kind of questions.

Keywords: Euler, Chebyshev, Russian mathematics, Segner machine, steam engine, geography, artillery, ballistics, gunnery, cartography, elliptic integrals, continued fractions, distribution of primes.

Cite this article: Papadopoulos A. On Euler and Chebyshev, at the Foundation of Russian Mathematics. *Russian Journal of Cybernetics*. 2021;2(2):42–63. DOI: 10.51790/2712-9942-2021-2-2-4.

ПРО ЭЙЛЕРА И ЧЕБЫШЁВА, ОСНОВАТЕЛЕЙ РОССИЙСКОЙ МАТЕМАТИКИ

А. Пападопулос

*Университет Страсбурга, Национальный центр научных исследований Франции, Страсбург,
 Франция, papadop@math.unistra.fr*

Аннотация: по случаю двухсотлетнего юбилея Чебышёва я изучил часть его работ и пришел к выводу, что в целом ряде моментов он продолжает научные традиции Эйлера. Я рассматривал работы Эйлера и Чебышёва по трем прикладным темам: промышленное оборудование, баллистика и география, а также по трем разделам чистой математики: интегральное исчисление, непрерывные дроби и теория чисел. Показано, что во всех случаях оба математика изучали один и тот же круг вопросов.

Ключевые слова: Эйлер, Чебышёв, российская математика, Сегнерово колесо, паровая машина, география, артиллерия, баллистика, оружейное дело, картография, эллиптические интегралы, непрерывные дроби, распределение простых чисел.

Для цитирования: Пападопулос А. Про Эйлера и Чебышёва, основателей российской математики. *Успехи кибернетики*. 2021;2(2):42–63. DOI: 10.51790/2712-9942-2021-2-2-4.

Introduction

We celebrate this year the two-hundredth anniversary of the birth of Pafnuty Lvovich Chebyshev (1821–1874), considered as the founder of a remarkable mathematical school in Saint Petersburg usually referred to as the “first Russian mathematical school”, to distinguish it from the previous mathematical school, which can naturally be termed “first mathematical school in Saint Petersburg”, that prevailed there for more a century, which was founded by Leonhard Euler and which was dominated by the latter's disciples and by mathematicians that were mostly trained in the West.

Chebyshev and Euler were both involved in several fields of pure and applied mathematics. For each of them, a non-negligible part of the work he did in theoretical mathematics was impelled by applications in the other sciences, and, conversely, the applications he worked on were steered by his research in pure mathematics. Since it is not possible in a few pages to consider all the subjects on which these two prominent mathematicians worked, I have chosen, to illustrate my argument, six topics: three from pure mathematics and three from applied. I will start with the latter. In the next sections, I will talk respectively about machines, artillery, geography, then integration, continued fractions and number theory. I have already considered relations between Euler and Chebyshev's works in the article [1] which appeared in the same journal.

It is known that Chebyshev was a devoted reader of Euler, and more generally, of mathematicians from the past. The authors of the biography contained in his Collected Works edition [2] write that he was an industrious reader of Euler, Lagrange, Gauss and Abel, and that as a general rule he avoided reading the mathematical works of his contemporaries, considering that this would distract him from having original

ideas. Thus, it is not surprising that Chebyshev was influenced by the work of Euler. I will take advantage of this commemoration to talk about the two mathematicians, Euler and Chebyshev, highlighting several ways in which the latter was a heir of the former.

Most of Euler's written work and correspondence is now published in his *Opera Omnia* (Collected Works edition), and I shall refer to it. When quoting Chebyshev's works, I shall generally use his French Collected works edition [2], and sometimes the more recent Russian Collected works edition [3] which contains more material.

The present text arose from notes I wrote for three talks I gave at conferences dedicated to the 200th anniversary of Chebyshev: on May 14, 2021, in Obninsk, the chief-town of a small region to which belongs Okatovo, the village where Chebyshev was born; on May 16, 2021 at the Euler International Mathematical Institute in Saint Petersburg, and on May 23, 2021 at Surgut State University. I would like to thank Valerii Galkin, the organizer of the conferences in Obninsk and Surgut, for his invitation to give the talks there, and for motivating me to write this article, and Anton Baranov, who invited me to give the talk at the Saint Petersburg conference.

Mechanical engines

Let me start by a few words of historical context, which will bring us back to the foundation of the city of Saint Petersburg.

Peter the Great's contribution to the development of mathematics in Russia is seldom enough emphasized. Mechanical engines, which constitute the subject of the present section, together with the sciences of artillery and geography which we shall discuss later in this paper, were among his priorities when he decided to found the Saint Petersburg Academy of Sciences. At the same time, the tsar was aware of the fact that in order for his country to be at the forefront in these fields, it was necessary to promote there the study of mathematics.

Bringing mathematics to Russia was not an easy task. Peter the Great first attempted to send Russians to learn mathematics in Western Europe, but this was not conclusive, because the adaptation of the Russian young men that were sent turned out to be difficult. He then created what was called "ciphering" schools for teaching elementary mathematics to Russian children, but this also did not bring significant results. He ordered the translation of mathematical works of Euclid, Descartes, Leibniz and Newton, but the impact of this project was also low, because of lack of readers. The impetus for the beginning of high-level mathematics in Russia came later, after the tsar made several visits to the West, where he encountered preeminent scientists, in particular at the Paris Royal Academy of Sciences. He decided to attract outstanding mathematicians to Saint Petersburg, in order to establish a strong mathematics section at the Academy of Sciences which he had decided to found, and which he wanted to be of the same level of the French Academy of Sciences or the London Royal Society, with the additional stipulation that the scientists in the Saint Petersburg Academy were asked to teach. This is how remarkable mathematicians like Nicolas and Daniel Bernoulli and Christian Goldbach arrived to Saint Petersburg, followed by the young Leonhard Euler (he was 19), who became later on the leading mathematician of the eighteenth century. We refer the reader to the book [4] for a comprehensive account of this side of Russian science history.

Euler was interested in all fields of pure and applied mathematics, and mechanics was one of his favorite subjects. His work on this topic transformed it into a mathematical science, based on integral and differential calculus. He introduced methodically in the solution of mechanical problems the techniques he developed for differential equations, integration and infinite series. Among his achievements in mechanics, we mention the systematic use of the equations of motion, a thorough study of the dynamics of rigid bodies, and the application of the methods of the calculus of variations in the solution of problems in elasticity and hydrodynamics. A major reference for Euler's work on mechanics is his 2-volumes *Mechanica* [5, 6], but he also wrote many other memoirs on this topic, and we shall review some of them.

Besides theoretical mechanics, Euler was interested in several practical mechanical problems, making connections between mathematics and engineering. He wrote more than 40 memoirs on machines. We mention a few of them, because they give us an idea of the questions he dealt with:

- *Discussion plus particulière de diverses manières d'élever de l'eau par le moyen des pompes avec le plus grand avantage* (A more particular discussion on the various methods of raising water using pumps with the greatest advantage) [7] (1754);

- *Recherches plus exactes sur l'effet des moulins à vent* (More exact researches on the effect of wind-mills) [8] (1758);
- *Sur l'action des scies* (On the action of saws) [9] (1758);
- *Scientia navalis* (Naval science), a fundamental treatise in 2 volumes totaling more than 1000 pages, published in 1738 and 1749, [10, 11], in which Euler sets the foundations of the theory of naval science; the treatise includes sections on hydrostatics, equilibrium, stability, resistance, etc.

To give an idea of some of Euler's work on machines, I will consider especially his memoirs in which he studied a turbine known as the Segner turbine (also called Segner wheel). This is a water turbine which was used, in the eighteenth century, as a low cost power source for mills, in Germany and probably in other countries as well. The machine was conceived around the beginning of the 1750s by the Hungarian-born mathematician and engineer Johann Andreas von Segner (1704–1777), who was the first professor of mathematics at the University of Göttingen and who, later, at the recommendation of Euler, became professor in Halle and corresponding member of the Saint Petersburg and Berlin Academies and of the London Royal Society. His discovery of the turbine that was later called after his name was based on work on water jet action done by Daniel Bernoulli, who was Euler's close friend and among his first colleagues in Saint Petersburg. Segner's machine is also considered as a modern version of the aeolipile, a water turbine invented by Heron of Alexandria (1st c. AD) which works according to the same principle and which is considered as the first known steam engine.

During his stay in Berlin (1741–1766), Euler became thoroughly interested in the Segner turbine, and he wrote several memoirs on this topic, among which we mention the following:

- *Recherches sur l'effet d'une machine hydraulique proposée par M. Segner, professeur à Göttingue* (Researches on the effect of a hydraulic machine proposed by M. Segner, professor at Göttingen), [12], published in 1752;
- *Application de la machine hydraulique de M. Segner à toutes sortes d'ouvrages et de ses avantages sur les autres machines hydrauliques dont on se sert ordinairement* (Application of the hydraulic machine of Mr. Segner to all sorts of situations, and on its advantages over the other hydraulic machines which are ordinarily used) [13], published in 1753;
- *Théorie plus complète des machines qui sont mises en mouvement par la réaction de l'eau* (A more complete theory of the machines that are put in motion by water reaction) [14], published in 1756;
- *De motu et reactione aquae per tubos mobiles transfluentis* (On the motion and reaction of water flowing through moving tubes) [15], published in 1761;
- *Détermination de l'effet d'une machine hydraulique inventée par M. Segner, professeur à Göttingue* (The determination of the effect of a hydraulic machine invented by Mr. Segner, a Professor at Göttingen), written in 1752 and published posthumously.

These works contain a detailed analysis of the functioning of this hydraulic machine. For Euler, working on these memoirs was also the occasion to apply in a particularly interesting practical instance his theoretical researches in mechanics, hydrodynamics, and the theory of motion. Let us say a few more words on them.

In the memoir [13], Euler discusses the ways in which the Segner machine can be used in a most efficient manner, showing the advantages that it is capable of providing, comparing it to other sources of energy based on water flow. He demonstrates that by employing the same quantity of water and the same fall, the new machine produces an effect about four times greater than the other known machines, when they are most advantageously used. Figure 1 is extracted from this memoir. In the memoir [15], Euler computes the optimal proportions of the Segner machine. In the posthumous memoir [16] he declares that the principles of this machine are completely new because the pipes through which the water passes are not at rest, but are subject to a motion caused by the force of the water itself. Thus, the usual laws of hydraulics are not sufficient for the study of this machine, and a completely new approach is needed. In the same memoir he gives an outline of the construction of a new water turbine which became the basis of his later study of a centrifugal pump.

Most of all, this collection of memoirs constitute a detailed mathematical study of a mechanical device based on differential calculus. In this study, the shape of the vase, the motion, the curvature and the other geometrical properties of the pipes play central roles. Euler states the problems that he solved in the form of optimization problems. For instance, Problem 6 asks the following:

To find the most advantageous figure that one can give to the horizontal pipes, for which the machine has the largest effect.

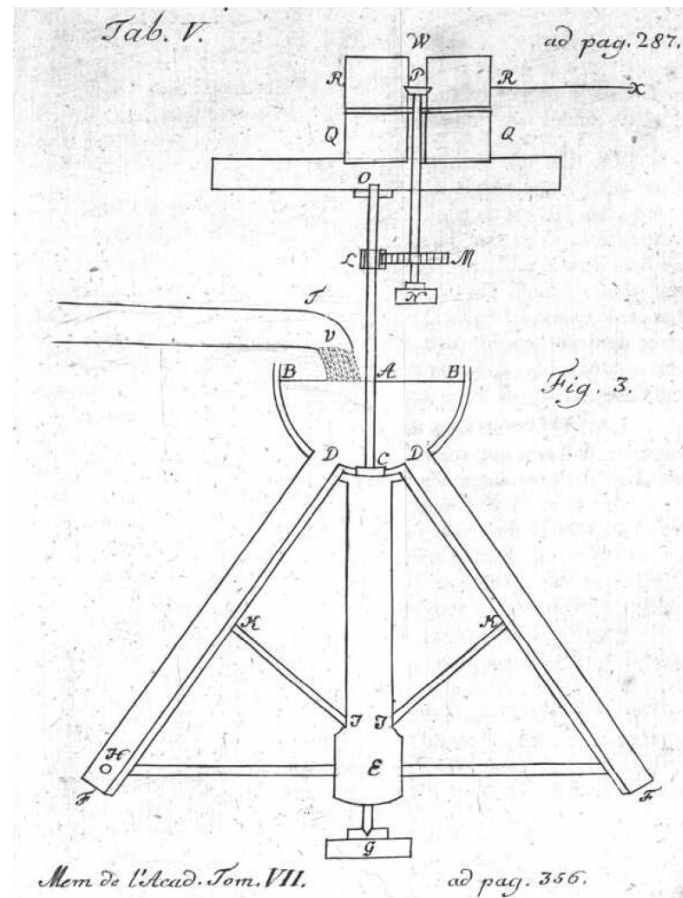


Figure 1. From Euler's memoir on Segner's hydraulic machine [13]

Among the other writings by Euler which concern machines and optimization, we mention his memoir *Maximes pour arranger le plus avantageusement les machines destinées à élever de l'eau par le moyen des pompes* (Maxims for the most advantageous arrangement of the machines designed to raise water by the use of pumps) [17]. Euler declares in this memoir that to set such a machine in motion, one can use the forces of water (rivers, etc.) or those of wind, or of men or of horses (he mentions incidentally that a single horse produces the same effect as a dozen men). His aim in his memoir is to find the most advantageous design for such a machine. He studies the various parameters that are involved with the aim of optimizing the results. For example, he searches for the speed with which the force, when it acts on the pumps that have to be put in action, produces the greatest benefit. The amount of water that a machine must raise also depends on the geometrical properties of the pipes. The shape and dimensions of these pipes are among the parameters that has to be optimized. In the same memoir, Euler considers other machines that are used to lift water and he presents applications to the functioning of windmills.

The Segner turbine, which we mentioned above, was considered as an important step in the later development of steam engines, see [18, p. 41]. Now we turn to the latter, with which Chebyshev was intensely concerned.

Chebyshev, like his famous predecessor, was most interested in mechanical engines. We learn from the biographies contained in his Collected Works [2] and from the article in his article *P. Tchêbychef and his scientific work* by Vassiliev [19] that since his childhood, one of his favorite occupations was the construction of mechanical toys, and that he kept this passion during the rest of his life. Wooden automata, speed regulators, calculating machines, mechanical linkages and other devices he constructed at various stages of his life are displayed in a number of museums and science galleries, including the Conservatoire National des Arts et Métiers in Paris, the Academy of Sciences in Saint Petersburg, the Museum of History

in Moscow, and the museum dedicated to Chebyshev, hosted in the school named after him in the village of Mashkovo, a few kilometers from his birth place.

As a student the University of Moscow, Chebyshev was highly attracted by the course on mechanics taught by N. D. Brashman (1796–1866), for whom he kept a profound respect, both as a mathematician and as a person. It is known that Chebyshev asked Brashman for a photograph that he always carried with him and that he still had it at the moment of his death. We also learn from Chebyshev's biography in [2] that after his arrival to Saint Petersburg, Chebyshev had close relations with another eminent mathematician, O. I. Somov (1815–1876), who was a specialist of applications of analysis and geometry to kinematics and the author of a geometric approach to theoretical mechanics. Let us also note that in addition to his work at Saint Petersburg's University and Academy of Sciences, Chebyshev taught applied mechanics at the Imperial Alexander Lyceum of Saint Petersburg.

Besides his interest in theoretical mechanics, Chebyshev, like Euler, was deeply interested in industrial machines. In a document reproduced in his Collected Works [2, vol. I, p. VII–XVIII], he reports on a trip he made to Western Europe in the summer of 1852, during which he spent a significant part of his time observing systems for raising water, agricultural machines, wind-mills, factories, cotton and flax spinning machines, metallurgical plants, foundries. He also visited several science museums in which he could contemplate steam engines. In the same report, Chebyshev makes detailed comments on the design of the wings of the wind-mills he saw during his journeys, expressing the desire to write analytical expressions for the surfaces of these wings in order to find the most economical way of using them in making oil, grinding grain, pounding flax, etc. We also learn from the same report that Chebyshev was particularly interested in the automata built by the French artist and mechanical engineer Jacques de Vaucanson (1709–1782), including automatic figures of the size of a human being that play music, models of digesting ducks which are capable of eating grains, then metabolizing and defecating them. Chebyshev was mostly fascinated by the steam engine invented by James Watt (1736–1819), the Scottish engineer who played a major role in the nineteenth century industrial revolution. He was particularly attracted by a piece of mechanism included in Watt's engine consisting of a mechanical linkage that transforms an almost circular motion of a rocker beam in the pumping part of the machine into the straight-line motion of a piston shaft. This linkage, to whom Chebyshev gave the name "Watt parallelogram", played a major role in his later work. It acted as a motivation for his investigations on approximation theory and on what became later known as the theory of linkages. In his report, Chebyshev makes a rather detailed review of the history of this linkage and its use in steam engines, explaining the reasons that led Watt to invent it and declaring that it is necessary to submit the Watt parallelogram and its variants to a rigorous scrutiny. Chebyshev declares that it is for this reason that he started studying conditions under which several elements of this mechanism in factory machines and on steamboats depend, and that, while he wanted to deduce the rules for the construction of these parallelograms, he encountered difficult problems of analysis which were still poorly studied. He says that the only person who tackled these problems was J.-V. Poncelet, the well-known French mathematician, engineer and general, and member the Academy of Sciences of Paris. Poncelet was known for his work in applied mechanics. Chebyshev points out that the theory of the Watt parallelogram, like several other problems in mechanics, requires formulae that are more general than those currently known.

As a matter of fact, Chebyshev's first published results on approximation theory are contained in his article on mechanical linkages titled *Théorie des mécanismes connus sous le nom de parallélogrammes* (The theory of mechanisms known under the name of parallelograms) [2, Vol. I, p. 111–143], published in 1854. In the introduction of this memoir, Chebyshev mentions, as a motivation for his work, the design of steam machines, and he explains that his aim in writing this article is to present a slight modification of Watt's parallelogram which reduces the deviation of the piston rod with respect to the pendulum of the machine. From the mathematical point of view, the problem needed approximation techniques which were much more elaborate than the existing ones. This led him to the basic question of finding a polynomial which approximates a function whose difference with the polynomial on a certain fixed small interval of the real line is minimal. Almost all the techniques that were available from analysis relied on the polynomials given by Taylor expansions, which give only approximations in the neighborhood of specific points, but they were not useful in the approximation problems along a whole interval. Legendre polynomials, introduced in 1782 by A.-M. Legendre, were already known, and they found applications in physics, but they had not been used in such approximation problems. This paper by Chebyshev contains his first investigations on

what became later known as the Chebyshev polynomials, and the beginning of his theory of orthogonal polynomials. The basic question addressed in this paper, viz., that of finding a mechanical linkage that transforms a rectilinear motion into a circular one, gave rise to a large amount of works, by Chebyshev and others. This problem was eventually solved and by A. Peaucellier [20] and, later, by Chebyshev's student L. Lipkin [21]. One talks now about the Lipkin–Peaucellier inverter, a linkage having seven elements; see the report in [22].

Chebyshev wrote several other articles on the same subject, and we mention the following memoirs:

- *Sur une modification du parallélogramme articulé de Watt* (On the modification of Watt's articulated parallelogram) [2, Vol. I, p. 533–538] (1861);
- *Sur les parallélogrammes* (On parallelograms), [2, Vol. II, p. 85–106] (1870);
- *Sur les engrenages* (On gears) [2, Vol. II, p. 129–161] (1875);
- *Sur les parallélogrammes composés de trois éléments et symétriques par rapport à un axe* (On the parallelograms composed of three elements symmetrical with respect to an axis) [2, Vol. II, p. 285–297] (1879);
- *Sur les parallélogrammes composés de trois éléments quelconques* (On the parallelograms composed of three arbitrary elements) [2, Vol. II, p. 301–331] (1890);
- *Sur les plus simples parallélogrammes qui fournissent un mouvement rectiligne aux termes du quatrième ordre près* (On the simplest parallelograms that provide a rectilinear motion up to terms of degree four) [2, Vol. II, p. 359–374] (1882);
- *Sur la transformation du mouvement rotatoire en mouvement sur certaines lignes, à l'aide de systèmes articulés* (On the transformation of the circular motion into a motion on certain lines, using articulated systems) [2, Vol. II, p. 726–732], (1884); *Sur les parallélogrammes les plus simples symétriques autour d'un axe* (On the simplest symmetrical parallelograms that are symmetrical around an axis) [2, Vol. II, p. 709–714] (1885).

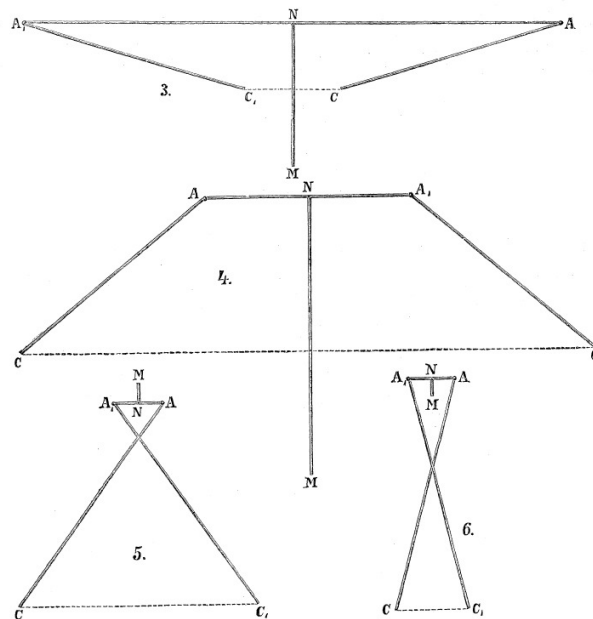


Figure 2. From Chebyshev's article [2, Vol. II, p. 709–714], concerning various forms of symmetrical mechanical linkages that produce straight lines

Chebyshev presented his results on linkages at several meetings of the Saint Petersburg Academy of Sciences, but also at the Association française pour l'avancement des sciences, a learned society whose aim was to promote science at various levels, connecting scientists and science amateurs coming from different backgrounds and establishing links between various fields of knowledge. Chebyshev participated to several meetings of this society, which were held in the summer, each year in a different city in France. He also presented his mechanical linkages and other machines he invented at the Columbian World's Fair (Chicago, 1893) and at the *Musée de l'École des Arts et Métiers* in Paris.

Like Euler, Chebyshev approached systematically the theory of machines using mathematical meth-

ods. Conversely, his study of linkages acted as a stimulus for his mathematical work on the theories of approximation and optimization.

Vassiliev in [19] reports that Chebyshev, for his work on the approximations of functions was not only motivated by problems raised in the theory of mechanisms, but also by problems on ballistics. In the next section, we shall report on Chebyshev's work on this topic, but before, that, we shall review Euler's work on the same subject.

Ballistics

I will start by mentioning a book by the English mathematician and military engineer Benjamin Robins (1707–1751). The latter was a student of Henry Pemberton, who was Newton's disciple and the editor of the third edition of the *Principia* (1726). Robins is well known for his invention of a method for measuring the speed and the kinetic energy of a projectile from the effect of its impact on a pendulum which was given the name ballistic pendulum. He was familiar with Euler's works on the theory of motion, and in 1739 he published an article titled *Remarks on Mr. Euler's Treatise of motion, Dr. Smith's complete system of optics, and Dr. Jurins essay upon distinct and indistinct vision* in which he discussed this theory, see [23]. Robins used several ideas of Euler on motion in his later works.

In 1742, Robins published a book titled *New Principles of Gunnery* [24]. Euler was very much interested in this topic, in which several of his ideas in physics could find their application. Indeed, gunnery involves the theory of motion, the nature of air and fire, the physics of air resistance, elasticity, fluid mechanics, the study of the dependence of air resistance and elasticity on temperature and their impact on the velocity of a projectile, etc. Furthermore, this was a time where Euler was working at the Berlin Prussian Academy under the auspices of Frederick the Great, and gunnery was a subject which was of high importance for the Prussian ruler.

Euler translated Robin's book into German, and he presented it, together with his own commentary, to the Berlin Academy of Sciences, in 1753, under the title *Neue Grundsätze der Artillerie* (New Principles of Gunnery) [25]. This translation, with the commentary, were in turn translated into English again, and published in 1777, by the British ballistician Hugh Brown, see [26]. A French edition of the same book, together with Euler's comments, was published in 1783 under the title *Nouveaux principes d'artillerie de M. Benjamin Robins, commentés par M. Leonard Euler* (New principles of artillery by Mr. Benjamin Robins, commented by Mr. Leonard Euler) [27].

In Euler's edition of Robin's work, each proposition of the latter is followed by several complements by Euler. These complements sometimes consist in small new sections proving the same results, in which Robins' geometrical methods are replaced by analytical methods, using the tools of calculus and algebra, which Euler considered easier for the student. Euler's complements also involve the introduction of tools from infinitesimal calculus and ideas originating in physics, from the study of air resistance and its elastic properties to that of the force of powder explosions. We note that Euler had already published several memoirs related to this topic, and we shall mention some of them below.

Let us give now a few examples of Robin's results.

Proposition VII of the first Chapter deals with the following problem:

Given the length and the diameter of a piece of cannon, together with the weight of the bullet, the charge of the powder and its elastic force at the first moment of the explosion, to determine the velocity with which the bullet is projected out of the cannon.

Proposition VI of Chapter 2 says the following:

The curve described in the air by a bomb, or a bullet, is not a parabola, and it is even not close to a parabola, unless the velocity of the body projected is very small.

In fact, Robins did not give the nature of that curve. Euler, in three different addenda to this proposition, developed the same subject based on his own researches on air resistance, treating three cases separately: the motion of a body projected horizontally, then vertically, and finally obliquely. In each case he determined and studied the nature of the curve obtained.

In 1727, Euler, who was only 21 years old, wrote a paper titled *Meditatio in experimenta explosione tormentorum nuper instituta* (Meditation on experiments made recently on the firing of a cannon) [28]. In

this paper, he describes seven experiments on gunnery performed between August 21 and September 2, 1727. The paper is known also because it is the first time that the letter e is used to represent the basis of natural logarithms. It was published posthumously, only in 1862 (that is, 79 years after Euler's death).

In 1755, Euler published a memoir on ballistics titled *Recherches sur la véritable courbe que décrivent les corps jetés dans l'air ou dans un autre fluide quelconque* (Researches on the real curve described by the bodies thrown into the air or into an arbitrary fluid) [29]. In this memoir, he starts by recalling that Galileo Galilei's discovery of the fact that a body projected obliquely in the air describes a parabola cannot be used in artillery, because the velocity of the projectiles that are used in this field (i.e. bombs, bullets, etc.) is very high, and air resistance is too large compared to gravity. Precisely, velocity and air resistance are the two parameters that divert projected bodies from following a parabolic trajectory, as they would do in vacuum. In this paper, Euler studies in detail these questions using the tools he had already developed in mechanics, improving results that were obtained by Johann Bernoulli. The latter had developed the mathematical aspect of the question of the trajectory of a bullet submitted to air resistance under the assumption that the bullet is subject to a force which is proportional to the square of its velocity, in addition to the gravitational force.

The French version of Euler's edition of Robins' book contains, as an appendix, excerpts from a memoir of Euler published in 1729, titled *Tentamen explicationis phaenomenorum aeris* (An essay on the explanation of the phenomena of air) [30], in which the author elaborates on his theory of the atmosphere.

In the nineteenth century, the field of ballistics was as much important as it was in the eighteenth. Vassiliev, in his biography [19, p. 10], writes that when Chebyshev was appointed on the chair of applied mathematics at the Saint Petersburg Academy, he was concerned with two problems in applied mathematics: the theory of mechanisms, and ballistics.¹ In fact, these are the two subjects that led Chebyshev to the development of the theory of approximations. From the same article, we learn that it was a problem in ballistics that was proposed to Chebyshev by his hierarchy in the artillery administration, that led him to concentrate on questions of interpolation [19, p. 17]. His written work on ballistics is reproduced in Volume V of the Russian edition of his complete works. An English summary is given in the article [31]. We can read there that in 1856 Chebyshev became a member of the Artillery committee of the Imperial Russian army, a committee which was in charge of introducing scientific novelties in Russian artillery. Three years after his nomination at that committee, Chebyshev was awarded the second-degree of the St. Anne Order, a highly valued medal, for his "three-year long meticulous and useful work, in addition to performing his direct duties at the Academy of Sciences, on mathematical research at the Artillery Committee, a work which turned out to be so beneficial for the development of rifle guns and shells." In 1867, Chebyshev obtained a formula for the range of spherical shells whose initial velocities are within a certain limit. His works on interpolation theory was in part motivated by the computation of a table on the effect of bullets based on experimental data. His Russian collected works edition [3, Vol. 5, p. 239] contain a document extracted from the Saint Petersburg Military Scientific Council of 1863, displayed in the Artillery museum of Saint Petersburg, presenting the difficult problems of artillery that needed to be solved using mathematical tools. We read there:

The efforts of officers well-versed in general mathematical sciences are not enough and call the assistance of great geometers. For many centuries outstanding geometers of all countries have been engaged in artillery studies and it is to them alone, of course, that artillery as a science owes the precious stock of rational and reasonable ideas.

The document's conclusion reads:

In the future, the Artillery Committee will be still very much in need of Chebyshev's assistance; if he abandons artillery, the committee will be compelled either to abandon the investigation into mathematics-based issues or turn to the mercy of Mr. Chebyshev, who, with no direct obligations before the committee, will have no reason to devote his precious hours of scientific research to artillery questions.

Chebyshev's results also include the application of probability theory in artillery, an explanation of the role of rotary motion in shell fire and the study of the optimal shape of a shell.

¹ As a matter of fact, Chebyshev was elected in 1853 on the chair of applied mathematics at the Saint Petersburg Academy, because the chairs of pure mathematics were already full (they were occupied by Fuss, Ostrogradsky, and Bunyakovsky). This reminds us of the fact that Euler, at his arrival in St Petersburg in 1727, was offered the chair of physiology, because the chair of mathematics-physics was occupied (by Daniel Bernoulli).

I will end this section with two pictures on ballistics. The first one, Figure 3, reproduces a drawing by Leonardo da Vinci extracted from the Codex Atlanticus.

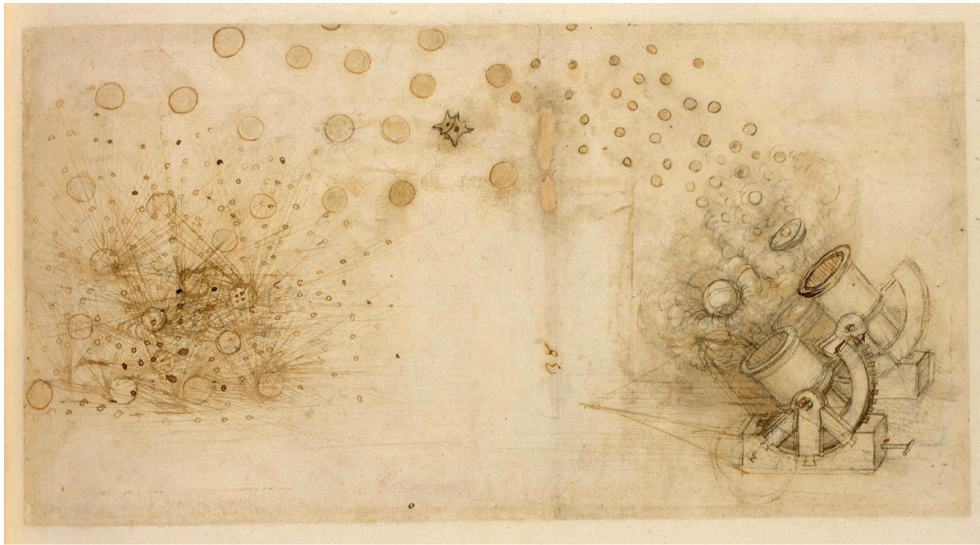


Figure 3. *From Leonardo's Codex Atlanticus*

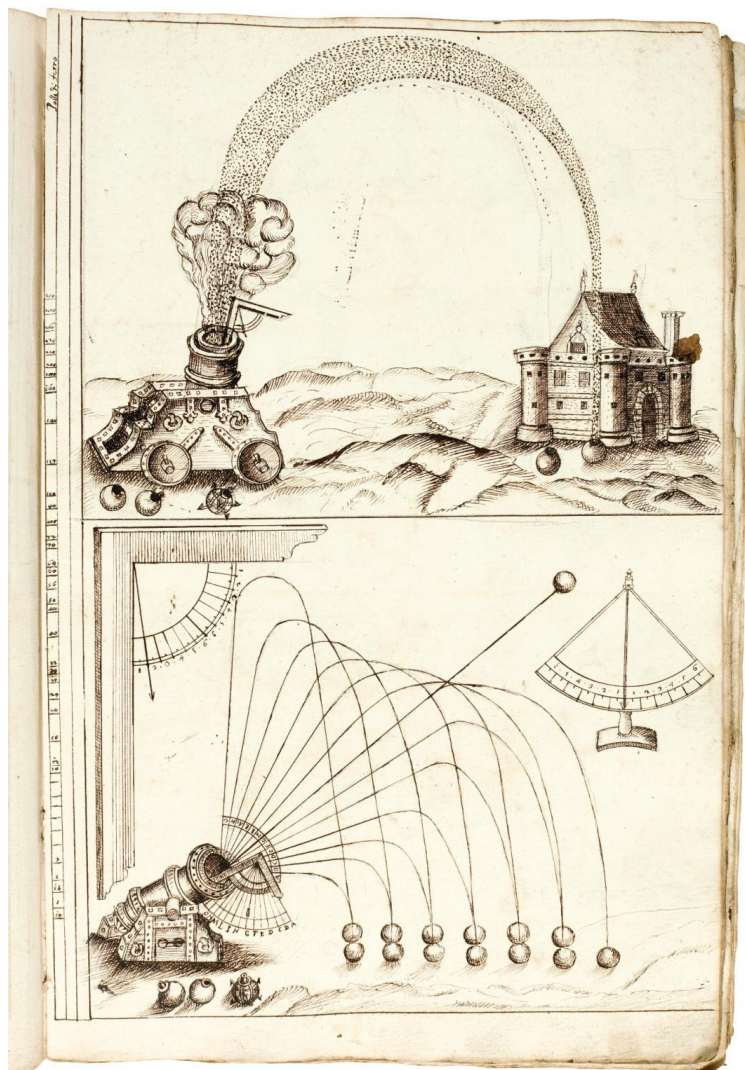


Figure 4. *From a 17th century manuscript on geometry and artillery.*

The second one, Figure 4, is also an Italian drawing. It is reproduced from an 17th century manuscript on geometry and artillery titled *Di alcuni principi di Geometria necessarij per intendere, e sapere fare spedissamente tutto quello che si appartiene ad un valoroso Bombardiere* (Some principles of Geometry necessary to understand and know how to do very quickly everything that belongs to a valuable bomber). The drawing is inspired from a drawing by the Spanish military writer and artist Diego Ufano.

We now pass to geography.

Geography

In Euler's times, the geography department at the Saint Petersburg Academy of Sciences was one of the most important departments. This section (like the one of astronomy) belonged to the class of mathematics, and it was headed by the famous French geographer Joseph-Nicolas Delisle. One of his main tasks was to make precise measurements of the Russian Empire and to draw geographical maps. For this, Delisle needed the help of mathematicians. He was first assisted by Daniel Bernoulli and Jakob Hermann, but later, these two left Russia and Euler became his main collaborator. Eventually, the relations between Delisle and the Academy's administration became tense, and Euler became himself the leader of the geography department. As such, he became responsible for the publication of the so-called *Atlas Russicus* (the "Russian Atlas"), a project which was one of the major enterprises at the Academy and of which Delisle was in charge previously. The *Russian atlas* was eventually published under the direction of Euler, in 1745. It carried the title *Atlas Russicus mappa una generali et undeviginti specialibus vastissimum Imperium Russicum adjacentibus regionibus secundum leges geographicas, et recentissimas observationes delineatum exhibens* (Russian Atlas containing a general map and nineteen particular maps of the whole Russian Empire and its limiting countries in conformity with the rules of geography and the most recent observations), see [32]. It contains 20 maps, including a general map of the Russian empire and nineteen particular maps.

In Figures 5 and 6, we have represented two of these maps.



Figure 5. Map of the Russian Empire, extracted from Euler's *Atlas Russicus* Saint Petersburg, 1745 [32], Bibliothèque nationale de France, Département Cartes et plans

In 1753, Euler published another atlas, this time under the auspices of the Prussian Academy of Sciences in Berlin where he had settled [33]. The atlas was meant essentially for the use of school children. It contains 44 maps, representing all the regions of the Earth. One should remember in this respect that a fierce international competition was taking place in that period, for the drawing and publishing of maps of Russia and its bordering countries (in particular China and Japan). Furthermore, in both academies, the selling of individual maps was a non-negligible source of income. In Figure 7, we have reproduced a map from the Prussian atlas, representing the land of Palestine. This map was especially intended for religious studies classes.



Source gallica.bnf.fr / Bibliothèque nationale de France

Figure 6. Map of part of Siberia, extracted from Euler's *Atlas Russicus*, Saint Petersburg, 1745 [32], Bibliothèque nationale de France, département Cartes et plans



Figure 7. Map of part Palestine, extracted from Euler's *Atlas Geographicus*, Berlin 1753 Atlas, David Rumsey Map Collection at Stanford University Libraries

Euler wrote several articles related to geography. We briefly review some of them, explaining the context.

In the last quarter of the seventeenth century, the sphericity of the Earth was challenged by Newton, who deduced from his gravitation theory developed in the *Principia*, that the Earth was rather spheroidal than spherical. A spheroid is a figure obtained by the revolution of an ellipse along one of its two axes. More precisely, Newton considered that the Earth is a spheroid whose axis is the axis around which the Earth actually revolves, and that its form is that of an orange, flattened at the top and at the bottom. A large debate around this question kept busy the scientific community of the Eighteenth century during several decades, a debate in which Euler was involved. A conflict arose between, on the one side, supporters of the Newtonian theory, including Delisle and Euler, and on the other hand, the “French geographers” led by the influential astronomers of the Cassini family, in charge of the Paris Observatory, who considered on the contrary that the Earth has the form of a spheroid which, like an egg, is elongated at the poles and flattened at the equator.

With the appearance of the new theories of the figure of the Earth, many geographical and astronomical results that were obtained during the preceding centuries needed to be revised. Euler wrote several geometrical memoirs on this subject, some of them theoretical, and others involving practical methods: finding the geodesics and measuring distances on a spheroid, drawing maps of regions on the spheroidal Earth, etc. Even elementary notions needed to be modified. For instance, with the Earth being considered as spheroidal and not spherical, the length of an arc of a meridian depends on the latitude.

In the memoir *Methodus viri celeberrimi Leonhardi Euleri determinandi gradus meridiani pariter ac paralleli telluris, secundum mensuram a celeb. de Maupertuis cum sociis institutam* (Method of the celebrated Leonhard Euler for the determination of a degree of a meridian, as well as of a parallel of the Earth, based on the measurement undertaken by the celebrated de Maupertuis and his colleagues) [34] (1750), Euler studies several problems in this new setting, including the determination of the length of a degree of a meridian from the latitude at a point.

In the memoir *De attractione corporum sphaeroidico-ellipticorum* (On the attraction of spherico-elliptical bodies) [35] (1747), he obtains a formula for the attraction between a particle situated at a pole and another one situated at the equator, taking into account the spheroidal shape of the Earth. His memoir *Éléments de la trigonométrie sphéroïdique tirés de la méthode des plus grands et plus petits* (Elements of spheroidal trigonometry drawn from the method of the maxima and minima) [36] contains the bases of spheroidal geometry. In particular, Euler gives there the formula for the distance between two locations on the surface of the Earth, given their latitude and longitude. Of course, the solution of this problem is much more involved than the analogous one in the case of a spherical Earth. One complication arises from the fact that the perpendicular line to the tangent space at a point of a spheroid does not pass through the center, except if this point is on the equator or at the poles, therefore the latitude at a point is equal to the angle that this perpendicular makes with the rotation axis of the Earth.

In the memoir titled *On the parallax of the moon with respect to its elevation and azimuth, under the hypothesis of a spheroidal earth* [37] (1751), Euler studies an astronomical problem in the setting of the spheroidal shape of the Earth. The term “parallax” in the title refers to the influence of the position of an observer on an object he sees in the sky. The object is, here, the moon. From the mathematical viewpoint, this is a coordinate change problem, in spheroidal geometry.

In 1738, Euler published an exposition, intended for general audience, of the problems represented by the shape of the Earth, *Von der Gestalt der Erden* (On the shape of the Earth) [38].

In 1777, he published three memoirs on the mathematical problem of drawing geographical maps, *De repraesentatione superficiei sphaericae super plano* (On the representation of spherical surfaces on the plane) [39], *De proiectione geographica superficiei sphaericae* (On a geographic projection of the surface of the sphere) [40] and *De proiectione geographica De Lisliana in mappa generali imperii russici usitata* (On Delisle’s geographic projection and its use in the general map of the Russian Empire) [41]. These memoirs constitute a major advance in cartography. Besides giving a firm basis to Delisle’s methods of map drawing, Euler systematically introduced in this field the use of differential equations and the methods of the calculus of variations. Together with Lagrange, who also published two long memoirs on the construction of geographical maps [42], Euler included this subject in the general setting of mappings between differentiable surfaces. The forthcoming book [43] contains a detailed account of Euler’s works on

geography and cartography, with their relation with other important eighteenth century works on the same subject.

Let us note that besides his work on the theoretical problems of cartography, Euler's duties at the Saint Petersburg and the Berlin Academies included the organization of the sale of geographical maps for the benefit of these academies. He was also asked to examine and to check thousands of maps that were printed there. This is mentioned at several places in his correspondence with the administration of the Academies, where we can also read that Euler became very annoyed with such tasks, and that he considered that the examination of so many maps was the reason for the deterioration of his vision. In a letter to Christian Goldbach, dated August 21st (September 1st, new Style), 1740, he writes (cf. [44] p. 163, English translation p. 672):

Geography is fatal to me. As you know, Sir, I have lost an eye working on it; and just now I nearly risked the same thing again. This morning I was sent a lot of maps to examine, and at once I felt the repeated attacks. For as this work constrains one to survey a large area at the same time, it affects the eyesight much more violently than simple reading or writing. I therefore most humbly request you, Sir, to be so good as to persuade the President by a forceful intervention that I should be graciously exempted from this chore, which not only keeps me from my ordinary tasks, but also may easily disable me once and for all.

From the purely geometrical point of view, the problem of drawing geographical maps is that of studying maps from a curved surface (in general, the sphere or a spheroid) onto a flat surface (the Euclidean plane). This gives rise to several interesting geometrical questions. Chebyshev, almost a hundred years later, became most interested in this subject, and we shall talk now about his work.

In 1856, Chebyshev wrote two memoirs on cartography with the title *Sur la construction des cartes géographiques* (On the construction of geographical maps) [2, Vol. 1, p. 233–236 and 239–247]. The title is the same as that of the two memoirs that Lagrange published fifty-seven years earlier [42]. Chebyshev's main technical notion that he used in this work is a mathematical concept of infinitesimal dilatation of a conformal map, which is based on a formula that Lagrange obtained. He introduced a notion of distortion of the map, which is a measure of how much the infinitesimal dilatation differs from its mean values over all the region represented. Chebyshev addressed the question of finding geographical maps whose distortion is minimal. Whereas Lagrange worked in the setting of a spheroidal Earth, Chebyshev considered the simpler case where the Earth is spherical. This mathematical problem of finding maps from the sphere to the Euclidean plane with minimal distortion is typically a problem in the calculus of variations, a field which was founded by Euler and Lagrange. Chebyshev introduced a new ingredient in this study, namely, the Laplace equation, establishing relations between the construction of geographical maps and the question of heat equilibrium. His main result in this domain reduced the search for the best geographical map to that of finding a solution of the Laplace equation with given boundary conditions. More precisely, he proved that for any a region of the sphere (representing a country), this distortion is smallest when dilatation on the boundary of the region is constant [2, t. I, p. 242].

In his memoirs on geography, Chebyshev compares his result in this domain with those that he obtained on linkages. He writes [2, p. 242]:

This problem is similar to those which were the subject of my dissertation on Watt's parallelogram, but it is related with a higher order such problems: one was looking for certain constant quantities, whereas here one must find two unknown functions, which corresponds to the determination of an infinite number of constant quantities. This establishes a distinction between these problems similar to the one that exists between the problems of differential calculus and those of calculus of variations. This subject is all the more interesting from a theoretical point of view because it is related to the investigation of an extremely remarkable partial differential equation, which expresses, for example, also the heat equilibrium in infinitely thin membranes. Thus the question of the best projection is related to the remarkable property of heat, namely: when heat is in equilibrium in an infinitely thin circular membrane, the temperature at the center is an *average* of the temperatures at all points on the circumference; a similar proposition is true for the sphere: the temperature at the center is an *average* of the temperatures at the surface.

We now point out another problem on geography on which Chebyshev worked, and which is analogous to a problem considered by Euler. We recall that the latter, in several memoirs, gave formulae,

based on trigonometric computations, giving the distances between two points on the Earth if one knows their latitude and longitude. In a note titled *Chebyshev's rule for the approximate evaluation of distances on the surface of the Earth*, published in the second volume of his collected works, Euler gave a practical rule for giving an approximation of this distance, avoiding the long trigonometric formulae. He first addressed the question: [2, t. II, p. 736]:

Given two locations on the surface of the Earth (considered to be spherical), determined by their geographical coordinates, that is, their longitude and latitude, to compute their actual distance.

He then gives the rule:

- 1) Express in minutes the difference in longitudes and latitudes of the two locations;
- 2) Take the double of the difference in latitudes;
- 3) From the two numbers, namely, the difference of longitudes and the double of the difference in latitudes, multiply the smallest by 3 and the largest by 7, and add the result.
- 4) The sum of the resulting two numbers, divided by 8, will give the required distance (in versts).²

I also discuss Chebyshev's work on cartography, making relations with works of Euler and with other topics, in the papers [1, 45–49] and the chapter of the forthcoming book that will be published on the occasion of the 2022 ICM in Saint Petersburg, [50].

I will pass now to works of Euler and Chebyshev on pure mathematics.

Integrals

Generally speaking, in the works of Euler and Chebyshev which we shall discuss in this section, integration was considered as the operation inverse to differentiation. We naturally start with Euler. The study of integrals in his work was intimately related to that of differential equations. Finding a formula for an indefinite integral $\int f$ is equivalent to solving a differential equation of the type $dy/dx = f(x)$. Of course, the modern idea of measure theory was not known, even though the geometric interpretation of the integral as the area of a region below a curve, or as the length of a curve, was known to Euler's; we shall talk about this soon. In fact, this subject has a long history in which the Bernoullis, Huygens and even earlier mathematicians were involved.

Euler wrote more than a hundred memoirs on integration. The three-volume treatise on the foundations of integral calculus, *Institutionum calculi integralis* (Institution of integral calculus) [51–53] contains many of his results on indefinite integrals and on differential equations. Among the huge class of integrals of functions that he studied, elliptic integrals play a major role. Between 1738 and 1882, he wrote more than 30 memoirs on these integrals. We shall say a few words about Euler's work on such integrals (together with their generalizations to the so-called Abelian integrals). Chebyshev also worked on this subject.

We start with an analogy. Whereas the integral $\int \frac{dx}{\sqrt{1-x^2}}$ represents the length of an arc of a circle centered at the origin, the integral $\int \frac{dx}{\sqrt{1-x^4}}$ represents the length of an arc of another curve in the plane (a lemniscate of polar equation $r^2 = \cos 2\theta$). More generally, the theory of elliptic integrals involves the study of properties of some integrals of plane curves (the term elliptic refers to the special case of an ellipse), and in this topic, one looks for properties that are analogous to those of integrals representing arcs of circles, that, in fact, are the trigonometric functions. For instance, one searches for sums and product formulae, for the existence of periods, etc. The subject of elliptic integrals can be traced back to Giulio Carlo de' Toschi di Fagnano and to Johann I Bernoulli. The latter was Euler's teacher in Basel. Finding general addition theorems for elliptic integrals became one of the major problems for the following hundred years, with works of Euler, Legendre, Abel, Jacobi and Riemann. Legendre, in his *Traité des fonctions elliptiques et des intégrales eulériennes* (1825–1828 3 volumes), highlights a special class of such integrals he calls Eulerian.

Let us mention a few memoirs by Euler on integration, whose title is always informative.

- *Specimen de constructione aequationum differentialium sine indeterminatarum separatione* (Example of the construction of differential equations without separation of the indeterminates) (1738) [54], where Euler gives a formula for arc lengths of ellipses;

² The verst is an ancient measure of distances used in Russia, equal to 1066.8 meters.

- *De integratione aequationis differentialis* $mdx/\sqrt{1-x^4} = ndy/\sqrt{1-y^4}$ (On the integration of the differential equations $mdx/\sqrt{1-x^4} = ndy/\sqrt{1-y^4}$) (1761) [55];
- *Observationes circa integralia formularum* $\int x^{p-1}dx(1-x^n)^{q/n-1}$ *posito post integrationem* $x = 1$ (Observations concerning the integrals of formulae $\int x^{p-1}dx(1-x^n)^{q/n-1}$ setting $x = 1$ after integration) (1766) [56];
- *Speculationes super formula integrali* $\int \frac{x^n dx}{a^2 - 2bx - cx^2}$, *ubi simul egregiae observationes circa fractiones continuas occurrunt* (Speculations concerning the integral formula $\int \frac{x^n dx}{a^2 - 2bx - cx^2}$, where at once occur exceptional observations about continued fractions) (published in 1786) [57]; in this memoir Euler uses continued fractions in problems of integration. We shall consider continued fractions in the next section.

In the nineteenth century, the study of indefinite integrals and the question of finding explicit formulae for integrals of some special functions in the huge collection of arbitrary functions was a fashionable topic in Russia (as it was in France). We recall incidentally that Lobachevsky, in struggling for the recognition of his discovery of non-Euclidean geometry, endeavored to find a large number of indefinite integrals, each time by calculating areas and volumes of certain domains of the hyperbolic plane or hyperbolic 3-space in two different manners and putting the results to be equal. Some of his papers contain a large number of such integrals. For him, this was a matter of finding applications of hyperbolic geometry.

We pass now to Chebyshev.

One of the very first works of Chebyshev is on integration theory. In 1843, he published in Liouville's journal a paper on multiple integrals titled *Note on a class of multiple indefinite integrals* [2, p. 3–6]. In this paper, he obtained new proofs of formulae of Liouville and Cauchy on the multiple integration of some special functions. The work immediately attracted the attention of French mathematicians. In the same issue of the journal, Catalan published a 2-page complement to Chebyshev's result, of which, therefore, he was aware, before the paper appeared in print.

In 1847, Chebyshev moved from Moscow to Saint Petersburg where he submitted a *pro venia legendi* dissertation titled *On integration by means of logarithms*. The problem he addressed was to express some indefinite integrals of the form

$$\int \frac{x + Adx}{\sqrt{x^4 + ax^3 + bx^2 + cx + d}}$$

in terms of logarithms of algebraic functions. This problem was posed by M. V. Ostrogradsky, one of the prominent mathematicians in Saint Petersburg. Chebyshev was working on this question since 1843, that is, since the publication of the paper we mentioned above. In his 1852 report on his journey to Western Europe which we quoted in §, Chebyshev writes that he chose the subject of this dissertation on the instigation of Liouville and Hermite. He mentions that such integrals involving only square roots of rational functions are the simplest and at the same time, they are most frequent in applications. In the same dissertation, he presented the state of the art for the general problem of integrating irrational differentials, quoting works of Jacobi, Abel and others. The dissertation was published posthumously in the Russian edition of Chebyshev's *Collected Works* [3, Vol. V]. A summary in French is contained in the French edition [2, Vol. II, p. xix–xx].

Chebyshev published later on a long series of papers on indefinite integrals, several of them in Liouville's journal. Along the years, he studied integrals of more and more complicated functions. We mention the following papers:

- *Sur l'intégration des différentielles irrationnelles* (On the integration of irrational differentials) [2, Vol. I, p. 147–168] (1853), in which Chebyshev presents a method for finding an algebraic expression for integrals of differentials of the form

$$R(x) \frac{dx}{\sqrt[n]{\theta x}}$$

where $R(x)$ is a rational function of x (a quotient of two polynomials) and θ a polynomial. His goal is to see whether these integrals are expressible by simple functions, and to investigate the number of logarithmic parts they involve. He uses techniques introduced by Abel and Liouville, which give representations of such integrals as infinite series. His article contains proofs of statements that were made without proof by Abel.

- *Sur l'intégration des différentielles qui contiennent une racine carrée d'un polynôme du troisième ou du quatrième degré* (On the integration of differentials that contain a square root of a polynomial of the third or fourth degree) [2, p. 171–200] (1857) in which Chebyshev shows how to find expressions for the integral

$$\int \frac{x+L}{x^4+lx^3+mx^2+nx+p} dx$$

under some hypothesis on the decomposability of the polynomial in the denominator, using a method of Abel involving a development in continued fraction of this function and searching for periodicity in this development.

- *Sur l'intégration des différentielles irrationnelles* (On the integration of irrational functions) [2, Vol. I, p. 511–514] (1860), which is a continuation of the preceding article, where Abel's methods are also used;
- *Sur l'intégration de la différentielle* $\int \frac{x+A}{\sqrt{x^4+\alpha x^3+\beta x^2+\gamma x+\delta}} dx$ (On the integration of the differential $\int \frac{x+A}{\sqrt{x^4+\alpha x^3+\beta x^2+\gamma x+\delta}} dx$) [2, Vol. I, p. 517–530] (1861) in which Chebyshev gives a method in the case where the coefficients $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ are rational;
- *Sur l'intégration des différentielles qui contiennent une racine cubique* (On the integration of differentials containing a cubic root) [2, p. 563–608] (1865);
- *Sur l'intégration des différentielles les plus simples parmi celles qui contiennent une racine cubique* (On the integration of the simplest differentials among those which contain a cubic root) [2, Vol. II, p. 43–47] (1867), in which Chebyshev shows that one cannot find explicit finite formulae for integrals of the form $\int \frac{\rho}{\sqrt[3]{x^3+ax+b}} dx$.

We now pass to continued fractions.

Continued fractions

We mentioned in the preceding section that Euler used the method of continued fractions in his work on integration which Chebyshev, later, used extensively. We make some comments on this method.

A continued fractions is originally an algorithm for finding an approximation of a real number by a sequence of rationals. This notion is contained in Euclid's *Elements* (see Propositions VII.1, VII.2 and X.2). It is the method that the Greeks (who called it *Anthyphairesis*) used to define incommensurability.

The modern theory of continued fractions starts in the work *L'algebra parte maggiore dell'aritmetica* (1572) by Rafael Bombelli, which this author uses to find approximations of square roots. A century later, John Wallis, in his *Arithmetica infinitorum* (1656) used continued in a more systematic way.

Euler started working on continued fractions in the early 1730s, but his first memoir on the subject, *De fractionibus continuis dissertatio* (A dissertation on continued fractions) [58], was published in 1744. In this memoir, he used continued fractions to solve the Riccati differential equation. At the same time, the memoir contains an introduction to the theory of continuous fractions, in which Euler also informs his reader that he was working on this subject since a long time, despite the fact that he had not published anything. Incidentally, he mentions the work of Wallis on this subject, and he also recalls that the method originates in the Euclidean algorithm. He notes that even though this notion is less used than infinite series or infinite products, it is a very efficient tool for obtaining approximations. After giving examples of continued fraction expansions (in particular for $\sqrt{2}$, $\sqrt[3]{2}$ and π), Euler gives a proof of the fact that periodic continued fractions arise from fractions that are solutions of quadratic equations. He then looks for patterns that are more general than periodicity, in particular, sequences displaying arithmetic progressions. He observes that the continued fraction expansion of e and its powers exhibit such special patterns, and he develops a method of finding the value of a continued fraction expansion whose denominators form an arithmetic progression. He then presents the solution of the Riccati equation in the form of a continued fraction expansion.

Euler's famous treatise *Introductio in analysin infinitorum* (Introduction to the analysis of the Infinite) [59, 60] (first volume published in 1748) contains several sections on continued fractions. In fact, the subject of this book consists of three major topics: infinite series, infinite products and continued fractions.

The memoir *De fractionibus continuis observationes* (Observations on continued fractions) [61] (1750) is a self-contained treatise on continued fractions and their applications, in which Euler claims that this is a completely new theory which is useful in all branches of analysis. There are many other memoirs

of Euler on continued fractions, including several on the solution of the Pell equation, in which continued fractions are used in an essential way.

Like Euler, Chebyshev used continued fractions expansions of functions in his study of integrals of certain irrational functions. His paper titled *On continuous fractions* [2, Vol. I, p. 201–230] contains the foundations of his theory of orthogonal polynomials. In this paper, presented in 1855, at the Saint Petersburg Academy, the method of least squares, continued fractions and Chebyshev polynomials are used to obtain an interpolation formula which gives a polynomial function approximating a certain function on a certain interval, from the values at certain points. The paper was translated into French by Bienaymé and published in Liouville's Journal in 1858. A few years later, Chebyshev's wrote to Brashman a letter carrying the title *On algebraic continued fractions*. The letter was read on September 30, 1865 at a meeting of the Moscow Mathematical Society. It was published in the same year in Liouville's Journal [2, Vol. 1, p. 611–614]. This letter is a sequel to the article *On the interpolation by the method of least squares*. In the introduction to the letter, Chebyshev reports on the use of algebraic continued fractions, together with the method of least squares, in interpolation theory. He shows that given two function u and v , one can find, by developing u in continued fractions, two polynomials X and Y such that the expression

$$uX - Y$$

is the closest possible to v . At the same time, he gives a method for finding the two polynomials X and Y . He further developed the same ideas in his memoir *Sur le développement des fonctions en série au moyen des fractions continues* (On the development of functions in series using continued fractions) [2, Vol. 1, p. 617–636] (1866), and in his much later memoir *Sur une série qui fournit les valeurs extrêmes des intégrales, lorsque la fonction sous le signe est décomposée en deux facteurs* (On a series that gives the extremal values of integrals, when the function is decomposed into two factors) [2, Vol. 2, p. 405–417] (1883).

Other interpolation techniques are developed in his paper *On the interpolation by the method of least squares* (1859) [2, Vol. 1, p. 473–498]. We finally mention the paper *On interpolation in the case of a great number of data obtained by observation* (1859) [2, Vol. 1, p. 387–469] whose title is self-explanatory.

Let us conclude this section by mentioning that Chebyshev also used continued fractions in his fundamental work on probability theory, see the paper *Sur l'interpolation des valeurs équidistantes* (On the interpolation of equidistant values) [2, Vol. 2, p. 219–242] (1875).

Number theory

I will end this paper by a few words on number theory, one of the major topics on which both Euler and Chebyshev worked. Of course, it is not possible to give an idea of the broadness of their works on this subject, and I will limit myself to a few remarks, indicating how Chebyshev was the heir of Euler in this field.

In fact, Chebyshev, very early in his career, examined all Euler's work on number theory. Indeed, at the time he became adjunct professor at the University of Saint Petersburg, the Academy of Sciences had started the far-reaching project of publishing Euler's collected works on number theory. The project was led by Bunyakovsky who, when he noticed Chebyshev's talents, proposed him to contribute to that edition. The 1849, two large volumes were published under the direction of Bunyakovsky and Chebyshev, carrying the title *Index systématique et raisonné des oeuvres arithmétiques d'Euler* (Systematic and rational index of the arithmetical works of Euler). The volumes included Euler's published paper on the subject (99 memoirs) together with annotations and corrections. (Indeed, several mistakes had been introduced in Euler's paper that were published in the last 17 years of Euler's life, a period where he was completely blind, and where he was relying on his young collaborators for writing his papers).

Chebyshev, like Euler, was totally involved in investigations around the distribution of prime numbers. This is probably the most difficult problem in number theory. Euler wrote the following about this question, in his paper titled *Discovery of a very extraordinary law of numbers in relation to the sum of their divisors* [62], written in 1747:

Mathematicians tried in vain, until now, to discover a certain order in the sequence of prime numbers, and we have reasons to think that this is a mystery which human mind will never be able to penetrate. To be convinced, it suffices to have a look at the tables of prime numbers, that a few persons have taken

the trouble to continue beyond one hundred thousand: one will primarily notice that there is no order and no rule there.

Chebyshev introduced completely new ideas in this area, developing methods that stand at the foundation of the field of analytic number theory. In 1848, he presented at the Saint Petersburg Academy of Sciences a paper titled *Sur la fonction qui détermine la totalité des nombres premiers inférieurs à une limite donnée* (On the function which determines the totality of prime numbers which are smaller than a given limit) [2, vol. I, p. 29–48] in which he starts the investigation of the function $\varphi(x)$ which to each positive integer x assigns the number of primes that are $\leq x$. He obtained the first important result on this function, correcting assertions that were made by Legendre before him, based on empirical observations and making them more precise. One of Chebyshev's results asserts that we can approximate this function by the integral $\int_2^x \frac{dx}{\log x}$, a result that was stated without proof by Gauss. The next year, Chebyshev defended a doctoral thesis on number theory titled *The theory of congruences*, which was published as a book which became a classic: it remained for several decades the only available Russian textbook on number theory. The next year (1850), Chebyshev published another paper on the distribution of primes, titled *Mémoire sur les nombres premières* (Memoir on prime numbers) [2, Vol. I, p. 51–70], in which he gave a proof of the Bertrand *postulatum* which asserts that for any $n > 3$, there always exists a prime number between a and $2a - 2$.

Let us recall the important result of Euler, relating a quantity indexed by all natural integers, and another quantity indexed by the set of primes, which, in fact, is Euler's famous equality between the zeta function and an infinite product:

$$\zeta(s) = \sum_{n=1}^{\infty} n^{-s} = \prod_{p=2}^{\infty} \left[1 - \left(\frac{1}{p^s} \right)^{-1} \right]$$

Here, n describes the set of positive integers and p the set of primes. In Chebyshev's 1848 memoir which we just mentioned, he recalls that Euler proved that the series

$$\frac{1}{2^a} + \frac{1}{3^a} + \frac{1}{5^a} + \frac{1}{7^a} + \frac{1}{11^a} \dots,$$

indexed by the primes, and the series

$$\frac{1}{2^a} + \frac{1}{3^a} + \frac{1}{4^a} + \frac{1}{5^a} + \frac{1}{6^a} \dots,$$

indexed by all integers ≥ 2 , converge or diverge for exactly the same values of a . (In fact, they both converge if and only if $a > 1$.) He then shows that this is not true in general, and he gives, as a counter-example, the series

$$\frac{1}{2 \log 2} + \frac{1}{3 \log 3} + \frac{1}{5 \log 5} + \frac{1}{7 \log 7} + \dots$$

indexed by the primes, which converges to a limit whose value is < 1.73 , whereas the series

$$\frac{1}{2 \log 2} + \frac{1}{3 \log 3} + \frac{1}{4 \log 4} + \frac{1}{5 \log 5} + \frac{1}{6 \log 6} + \dots,$$

indexed by all integers ≥ 2 , diverges. He then addresses the general problem of finding a *criterion* for the convergence of a series indexed by prime numbers, and in the case where this series converges, to find a good approximation of its sum. He describes a general approach to this problem, which involves considering the function $\theta(x)$ which, for any number x , gives the sum of the logarithms of all primes that are at most x .

The examples we gave should be sufficient to show that Chebyshev's work on number theory, like all his other works, were very closely connected with his passion for approximation theory.

Conclusion

In many ways, Chebyshev's work is in the continuity of that of Euler. These two exceptional mathematicians were interested in similar problems, sometimes the same questions, always combining theory and practice. Chebyshev's influence in Saint Petersburg was still felt long after him, where most of

the chairs of mathematics were occupied by his students or by mathematicians directly influenced by him. His impact was perceived far beyond the city of Saint Petersburg: some of his students and descendants founded mathematical schools in Kiev, Kharkov, Odessa, and in other centers of the Russian Empire. The combined efforts of Euler and Chebyshev are at the origin of the fame of the Saint Petersburg mathematical tradition. Their influence, beyond the city of Saint Petersburg and beyond Russia, is strongly felt worldwide.

REFERENCES

1. Papadopoulos A. Euler and Chebyshev: From the sphere to the plane and backwards. *Proceedings in Cybernetics*. 2016;2:56–70.
2. Chebyshev P. L. *Œuvres (French) and Sochinenia (Russian)*, 2 volumes, edited by A. Markov and N. Sonin. Saint Petersburg; Imprimerie de l'Académie Impériale des Sciences, 1899–1907.
3. Chebyshev P. L. *Complete Collected Works (Russian)*, 5 volumes, edited by I. I. Artobolevsky, S. N. Bernstein, N. G. Bruevich, I. M. Vinogradov, B. N. Delone, V. L. Goncharov, A. N. Kolmogorov, A. Krylov, L. S. Leibenson, V. I. Smirnov and S. L. Sobolev. Moscow-Leningrad; Izdatel'stvo Akad. Nauk SSR, 1946–1951.
4. Vucinich A. *Science in Russian culture: A history to 1860*. London; Peter Owen, 1965.
5. Euler L. *Mechanica*, Vol. 1, St. Petersburg: Imperial Academy of Sciences, Volume 1, p. 1–480. *Opera Omnia*, Series 2, Volume 1, p. 1–407.
6. Euler L. *Mechanica*, Vol. 2, St. Petersburg: Imperial Academy of Sciences, Volume 2, p. 1–500. *Opera Omnia*, Series 2, Volume 2, p. 1–459.
7. Euler L. Discussion plus particulière de diverses manières d'élever de l'eau par le moyen des pompes avec le plus grand avantage. *Mémoires de l'Académie des Sciences de Berlin*. 1754;8:149–184. *Opera Omnia*, Series 2, Volume 15, p. 251–280.
8. Euler L. Recherches plus exactes sur l'effet des moulins à vent. *Mémoires de l'Académie des Sciences de Berlin*. 1758;12:165–234. *Opera Omnia*: Series 2, Volume 16, p. 65–125.
9. Euler L. Sur l'action des scies. *Mémoires de l'Académie des Sciences de Berlin*. 1758;12:267–291. *Opera Omnia*, Series 2, Volume 17, p. 66–88.
10. Euler L. *Scientia navalis*, Vol. 1. St. Petersburg: Imperial Academy of Sciences. 1738;1:1–444. *Opera Omnia*, Series 2, Volume 18, p. 1–426.
11. Euler L. *Scientia navalis*, Vol. 2. St. Petersburg: Imperial Academy of Sciences. 1749;2:1–534. *Opera Omnia*, Series 2, Volume 19, p. 1–459.
12. Euler L. Recherches sur l'effet d'un machine hydraulique proposée par M. Segner, professeur à Göttingue. *Mémoires de l'académie des sciences de Berlin*. 1752;6:311–354. *Opera Omnia*, Series 2, Volume 15, p. 1–39.
13. Euler L. Application de la machine hydraulique de M. Segner à toutes sortes d'ouvrages et de ses avantages sur les autres machines hydrauliques dont on se sert ordinairement. *Mémoires de l'académie des sciences de Berlin*. 1753;7:271–304. *Opera Omnia*, Series 2, Volume 15, p. 105–133.
14. Euler L. Théorie plus complete des machines qui sont mises en mouvement par la réaction de l'eau. *Mémoires de l'académie des sciences de Berlin*. 1756;10:227–295. *Opera Omnia Citation*, Series 2, Volume 15, p. 157–218.
15. Euler L. De motu et reactione aquae per tubos mobiles transfluentis. *Novi Commentarii academiae scientiarum Petropolitanae*. 1761;6:312–337. *Opera Omnia*, Series 2, Volume 15, p. 80–104.
16. Euler L. Détermination de l'effet d'un machine hydraulique inventée par M. Segner, professeur à Göttingue, written in 1752, Euler's Opera Postuma. 1862;2:146–173. *Opera Omnia*, Series 2, Volume 15, p. 40–79.
17. Euler L. Maximes pour arranger le plus avantageusement les machines destinées à élever de l'eau par le moyen des pompes. *Mémoires de l'Académie des Sciences de Berlin*. 1754;8:185–232. *Opera Omnia*, Series 2, Volume 15, p. 281–318.
18. Sadovsky V. N., Kelle V. V. *Tektology. Book 1*. Center for System studies, University of Hull, 1996.
19. Vassilief A. P. *Tchébychef et son oeuvre scientifique*. I Turin; Bollettino di bibliografia e storia delle scienze matematiche, 1898.
20. Peaucellier A. Note sur une question de géométrie de compas. *Nouv. Ann. de Math.* 2e série. 1873;12:71–72.

21. Lipkin L. Dispositif articulé pour la transformation rigoureuse du mouvement circulaire en mouvement rectiligne. *Revue des Mines et de la Métallurgie de Liège*. 1871;30, 4e livraison:149–150.
22. Sossinsky A. Configuration spaces of planar linkages. *Handbook of Teichmüller theory*, Vol. VI (ed. A. Papadopoulos). Zürich; European Mathematical Society Publishing House, 2016. P. 335–373.
23. Robins B. *Remarks on Mr. Euler's Treatise of motion, Dr. Smith's complete system of optics, and Dr. Jurins essay upon distinct and indistinct vision*. London, 1739. Reprinted in: *Mathematical tracts of the late Benjamin Robins*. Esq. London, 1761. Vol. II.
24. Robins B. *New principles of gunnery: containing the determination of the force of gunpowder, and an investigation of the difference in the resisting power of the air to swift and slow motions*. London, 1742.
25. Euler L. *New principles of gunnery*. London, 1742. German edition: *Neue Grundsätze der Artillerie*. 1745. *Opera Omnia*, Series 2, Volume 14, p. 1–409.
26. Brown H. *The true principles of gunnery investigated and explained, comprehending translations of professor Euler's observations upon the new Principles of Gunnery, published by the late Mr. Benjamin Robins, and that celebrated author's Discourse upon the Track described by a body in a resisting medium, inserted in the Memoirs of the Royal Academy of Berlin, for the year 1753, to which are added many necessary explanations and remarks, together with tables calculated for practice, the use of which is illustrated by proper examples; with the method of solving that capital problem, which requires the elevation of the greatest range with any given initial velocity*. London; J. Nourse, 1777.
27. Euler L. *Nouveaux principes d'artillerie de M. Benjamin Robins*, commentés par M. Leonard Euler, translated into French by J. L. Lombard, Frantin, Dijon et Jombert, Paris, 1783.
28. Euler L. Meditatio in experimenta explosione tormentorum nuper instituta. *Opera Postuma* 2, 1862, p. 800–804. *Opera Omnia*, Series 2, Volume 14, p. 468–477.
29. Euler L. Recherches sur la véritable courbe que décrivent les corps jetés dans l'air ou dans un autre fluide quelconque. *Mémoires de l'académie des sciences de Berlin*. 1755;9:321–352. *Opera Omnia*, Series 2, Volume 14, p. 413–447.
30. Euler L. Tentamen explicationis phaenomenorum aeris. *Commentarii academiae scientiarum Petropolitanae*, Volume 2, p. 347–368. *Opera Omnia*, Series 2, Volume 31, p.1–18.
31. Prokhorov V. Pafnuty Chebyshev: To mark the 175th anniversary of his birth. *Teor. Veroyatnost. i Primenen.* 1996;41(3):613–627. English translation: *Theory Probab. Appl.* 1996;41(3):519–530.
32. Atlas Russicus mappa una generali et undeviginti specialibus vastissimum Imperium Russicum adjacentibus regionibus secundum leges geographicas, et recentissimas observationes delineatum exhibens. Academia imperialis Scientiarum Petropolitanae, 1745.
33. Euler L. Preface of the Atlas Geographicus omnes orbis terrarum regiones in XLI tabulis exhibens, Académie Royale des Sciences et Belles-Lettres de Prusse, Berlin, 1753. *Opera Omnia*, Series 3, Volume 2, p. 305–317.
34. Euler L. Methodus viri celeberrimi Leonhardi Euleri determinandi gradus meridiani pariter ac paralleli telluris, secundum mensuram a celeb. de Maupertuis cum sociis institutam. *Commentarii Academiae Scientiarum Petropolitanae*. 1750;12:224–231. *Opera Omnia*, Series 2, Volume 30, p. 73–88.
35. Euler L. De attractione corporum sphaeroidico-ellipticorum. *Commentarii academiae scientiarum Petropolitanae*. 1747;10:102–115. *Opera Omnia*, Series 2, Volume 6, p. 175–188.
36. Euler L. Éléments de la trigonométrie sphéroïdique tirés de la méthode des plus grands et plus petits. *Mémoires de l'académie des sciences de Berlin*. 1755;9:258–293. *Opera Omnia*, Series 1, Volume 27, p. 309–339.
37. Euler L. De la parallaxe de la lune tant par rapport à sa hauteur qu'à son azimuth, dans l'hypothèse de la terre sphéroïdique. *Mémoires de l'académie des sciences de Berlin*. 1751;5:326–338. *Opera Omnia*, Series 2, Volume 30, p. 140–150.
38. Euler L. Von der Gestalt der Erden, Anmerkungen über die Zeitungen. St. Petersburg, 3 April 1738 - 25 December 1738. *Opera Omnia*, Ser. III, Vol. 2, p. 325–346.
39. Euler L. De repraesentatione superficiei sphaericae super plano. *Acta Academiae Scientiarum Imperialis Petropolitanae*. 1777, p. 107–132. *Opera Omnia*, Series 1, Volume 28, p. 248–275.
40. Euler L. De proiectione geographica superficiei sphaericae. *Acta Academiae Scientiarum Imperialis Petropolitanae*. 1777, p. 133–142. *Opera Omnia*, Series 1, Volume 28, p. 276–287.

41. Euler L. De proiectione geographica De Lisliana in mappa generali imperii russici usitata. *Acta Academiae Scientiarum Imperialis Petropolitanae*. 1777, p. 143–153. *Opera Omnia*, Series 1, Volume 28, p. 288–297.
42. De Lagrange J.-L. Sur la construction des cartes géographiques, Nouveaux mémoires de l'Académie Royale des Sciences et Belles-lettres de Berlin, année 1779, Premier mémoire: *Œuvres complètes*, tome 4, p. 637–664. Second mémoire: *Œuvres complètes*, tome 4, p. 664–692.
43. Caddeo R., Papadopoulos A. (ed.) *Geography in the eighteenth century: Euler, Lambert and Lagrange*. Springer, to appear in 2021.
44. Leonhard Euler, *Opera Omnia*, Series quarta A, commercium epistolicum, Volumen quartum, Pars prima, (M. Mattmüller, F. Lemmermeyer, eds.). Birkhäuser, Basel, 2015.
45. Papadopoulos A. Quasiconformal mappings, from Ptolemy's geography to the work of Teichmüller. *Uniformization, Riemann-Hilbert Correspondence, Calabi-Yau Manifolds, and Picard-Fuchs Equations*. Ed. L. Ji and S.-T. Yau. International Press and Higher Education Press, ALM 42, 2018, p. 237–315.
46. Papadopoulos A. Maps with least distortion between surfaces: from geography to brain warping. *Notices of the American Mathematical Society*. November 2019:1628–1639.
47. Papadopoulos A. Mathematics and map drawing in the eighteenth century. *Ganita Bhārātī (Indian Mathematics)*. 2019;41(1–2):1–37.
48. Papadopoulos A. Map drawing and foliations of the sphere. *Russian Journal of Cybernetics*. 2020;1(1):42–49.
49. Papadopoulos A. Pafnuty Chebyshev and geography. To appear in the *Mathematical Intelligencer*, 2021.
50. Papadopoulos A. On Chebyshev's work on geography. *Mathematicians from Saint Petersburg and their theorems*, ed. Nikita Kalinin, St. Petersburg State University Publishing House, to appear in 2022.
51. Euler L. Institutionum calculi integralis. St. Petersburg, Imperial Academy of Sciences. 1768;1:1–542. *Opera Omnia*, Series 1, Volume 11, p. 1–462.
52. Euler L. Institutionum calculi integralis. St. Petersburg, Imperial Academy of Sciences. 1769;2:1–542. *Opera Omnia*, Series 1, Volume 12, p. 1–542.
53. Euler L. Institutionum calculi integralis. St. Petersburg, Imperial Academy of Sciences. 1770;3:1–639. *Opera Omnia*, Series 1, Volume 13, p. 1–508.
54. Euler L. Specimen de constructione aequationum differentialium sine indeterminatarum separation. *Commentarii academiae scientiarum Petropolitanae*. 1738;6:168–174. *Opera Omnia*, Series 1, Vol. 20, p. 17.
55. Euler L. Observationes circa integralia formularum $\int x^{p-1} dx (1 - x^n)^{q/n-1}$ posito post integrationem $x = 1$, *Novi Commentarii academiae scientiarum Petropolitanae*. 1761;6:37–57. *Opera Omnia*, Series 1, Volume 20, p. 58–79.
56. Euler L. Observationes circa integralia formularum $\int x^{p-1} dx (1 - x^n)^{q/n-1}$ posito post integrationem $x = 1$ (Observations concerning the integrals of formula $\int x^{p-1} dx (1 - x^n)^{q/n-1}$ setting $x = 1$ after integration). *Mélanges de philosophie et de la mathématique de la société royale de Turin*. 1766;3:156–177. *Opera Omnia*, Series 1, Volume 17, p. 268–288.
57. Euler L. Speculationes super formula integrali $\int \frac{x^n dx}{a^2 - 2bx - cx^2}$, ubi simul egregiae observationes circa fractiones continuas occurrunt. *Acta Academiae Scientiarum Imperialis Petropolitinae*. 1786:62–84. *Opera Omnia*, Series 1, Volume 18, p. 244–264.
58. De fractionibus continuis dissertation. *Commentarii academiae scientiarum Petropolitanae*. 1744;9:98–137. *Opera Omnia*, Series 1, Volume 14, p. 187–216.
59. Euler L. Introductio in analysin infinitorum, vol. 1, 1748. Lausanne: Marcum-Michaelem Bousquet, Volume 1, p. 1–320. *Opera Omnia*, Series 1, Volume 8, p. 1–392.
60. Euler L. *Introduction to Analysis of the Infinite*. Trans. J. D. Blandon. New York and Berlin; Springer Verlag, 1988.
61. De fractionibus continuis observations. *Commentarii academiae scientiarum Petropolitanae*. 1750;11:32–81. *Opera Omnia*, Series 1, Volume 14, p. 291–349.
62. Euler L. Découverte d'une loi tout extraordinaire des nombres par rapport à la somme de leurs diviseurs. *Bibliothèque impériale*. 1751;3:10–31. *Opera Omnia*, Series 1, Vol. 2, p. 241–253.
63. Atlas Geographicus omnes orbis terrarum regiones in XLIV tabulis exhibens, Académie Royale des Sciences et Belles Lettres de Prusse, Berlin, 1753. *Opera Omnia*, Series 3, Volume 2, p. 305–317.
64. Euler L. Variae observationes circa series infinitas. *Commentarii academiae scientiarum Petropolitanae*.

- 1744;9:160–188. *Opera Omnia*, Series 1, Vol. 14, p. 217–244.
65. Euler L. Index systématique et raisonné des oeuvres arithmétiques d'Euler par MM. Bouniakovsky et Tchébychef. Leonh. Euleri Commentationes arithmeticae collectae, vol. I and II, 1849.
66. Euler L. De repraesentatione superficiei sphaericae super plano. *Acta Academiae Scientarum Imperialis Petropolitinae*. 1778:107–132. *Opera Omnia*, Series 1, Volume 28, p. 248–275.

DOI: 10.51790/2712-9942-2021-2-2-5

MAXIMUM ENTROPY METHOD FOR TIME-SERIES DATA OBTAINED FROM REAL-TIME EVOLUTION OF TIME DEPENDENT DENSITY FUNCTIONAL THEORY**Yasunari Zempo^a, Satoru S. Kano^b***Hosei University, Tokyo, Japan*^a ORCID: <http://orcid.org/0000-0001-8760-8489>, zempo@hosei.ac.jp^b ORCID: <http://orcid.org/0000-0002-0081-0121>, kano@hosei.ac.jp

Abstract: the maximum entropy method is one of the key techniques for spectral analysis. The main feature is to describe spectra in low frequency with short time-series data. We adopted the maximum entropy method to analyze the spectrum from the dipole moment obtained by the time-dependent density functional theory calculation in real time, which is intensively studied and applied to computing optical properties. In the maximum entropy method analysis, we proposed that we use the concatenated data set made from several-times repeated raw data together with the phase. We have applied this technique to spectral analysis of the dynamic dipole moment obtained from time-dependent density functional theory dipole moment of several molecules such as oligo-fluorene with $n = 8$. As a result, the higher resolution can be obtained without any peak shift due to the phase jump. The peak position is in good agreement to that of FT with just raw data. This paper presents the efficiency and characteristic features of this technique.

Keywords: spectrum analysis, time series data, maximum entropy method, time-evolution, time-dependent density functional theory.

Acknowledgements: the authors would like to express their gratitude to Professor H. Hanaizumi for useful discussions, and to Professor V. Savchenko for enthusiastic encouragements. This work was partially supported by JSPS Grants-in-Aid for Scientific Research (C) Grant number 16K05047, and Sumitomo Chemical, Co. Ltd.

Cite this article: Zempo Y., Kano S. S. Maximum Entropy Method for Time-Series Data Obtained from Real-Time Evolution of Time Dependent Density Functional Theory. *Russian Journal of Cybernetics*. 2021;2(2):64–73. DOI: 10.51790/2712-9942-2021-2-2-5.

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА МАКСИМАЛЬНОЙ ЭНТРОПИИ К ВРЕМЕННЫМ РЯДАМ, ПОЛУЧАЕМЫМ В РЕАЛЬНОМ ВРЕМЕНИ В РАМКАХ НЕСТАЦИОНАРНОЙ ТЕОРИИ ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ**Я. Земпо^a, С. С. Кано^b***Университет Хосэй, Токио, Япония*^a ORCID: <http://orcid.org/0000-0001-0760-8489>, zempo@hosei.ac.jp^b ORCID: <http://orcid.org/0000-0002-0081-0121>, kano@hosei.ac.jp

Аннотация: метод максимальной энтропии — один из основных в спектральном анализе. Его главная особенность — описание низкочастотных спектров короткими временными рядами данных. Авторы применили метод максимальной энтропии для анализа спектров дипольного момента, полученных расчетами в реальном времени по нестационарной теории функционала плотности. Данный вопрос интенсивно изучается и находит практическое применение при расчетах оптических свойств. При анализе методом максимальной энтропии предложено использовать объединенные наборы данных, включающие несколько повторяющихся последовательностей исходных данных с учетом фазы. Данный метод был применен при проведении спектрального анализа динамического дипольного момента, рассчитанного по нестационарной теории функционала плотности на основе дипольного момента нескольких молекул — в частности, молекул олигофлуорена при $n = 8$. В итоге удалось повысить разрешение без смещения максимумов из-за скачка фазы. Положение максимумов хорошо согласуется с результатами применения преобразования Фурье к необработанным исходным данным. В настоящей статье представлены особенности данного метода и показатели его эффективности.

Ключевые слова: спектральный анализ, временные ряды данных, метод максимальной энтропии, развитие во времени, нестационарная теория функционала плотности.

Благодарности: авторы выражают благодарность проф. Х. Ханаизуми (H. Hanaizumi) за полезные обсуждения и проф. В. Савченко за всемерную поддержку исследования. Работа частично поддержана субсидией на научные исследования № 16K05047, предоставленной Японским обществом развития науки (JSPS), а также компанией Sumitomo Chemical, Co. Ltd.

Для цитирования: Земпо Я., Кано С. С. Применение метода максимальной энтропии к временным рядам, получаемым в реальном времени в рамках нестационарной теории функционала плотности. *Успехи кибернетики*. 2021;2(2):64–73. DOI: 10.51790/2712-9942-2021-2-2-5.

Introduction

The maximum entropy method (MEM) is frequently used to analyze natural phenomena with long periods such as earth and planetary science, and seismic waves and tsunamis that can be measured for a short time [1]. However, little research has been done on applying MEM to the optical spectrum analysis associated with the electronic structure calculation. The purpose of the research is to apply this method to electronic state calculation.

Time-dependent density functional theory (TDDFT) is one of the most prominent and widely used tool for calculating excited states. A real-time and real-space technique is employed to solve the time-dependent Kohn-Sham equations. Within the framework of this approach, the wave functions are calculated by the finite difference method on real spatial grids [2, 3] without using explicit bases such as plane waves or Gaussian. In our procedure to calculate optical properties, we use the time-series data, namely the dynamic dipole moment. In a usual technique, Fourier transform (FT) is applied to it for calculating optical properties to derive the electronic transition spectrum from TDDFT. The most useful information is obtained in the low frequency region. Since the spectral resolution depends on the total time length of the dipole moment, to obtain the good resolution, the computational cost becomes quite expensive.

To solve this difficulty, we focus on Maximum Entropy Method (MEM) [4] which is one of the key techniques of spectrum analysis. MEM is based on the of the information theory for estimating unknown probability distributions relevant to the information about their expected values. The main feature is to obtain a fairly high resolution and accuracy with a relatively small number of time-series data. This technique was applied to the spectral analysis of time-dependent dipole moments of molecules, which is calculated by real-time TDDFT, and evaluated the efficiency of this method. We realize that MEM needs less time step than FT to obtain the optical spectrum with same level resolution [5]. Further, we proposed to use the concatenated data set made from several-times repeated raw data [6] together with the phase to minimize the side effect of the artificial periodicity. The introduction of this MEM provides the much better spectral resolution of the target peak near the energy gap.

The paper is organized as follows. In the next section, we briefly describe a procedure of our TDDFT calculation. Then, we explain MEM and our signal enhancement technique. In following section, we present our results of absorption spectra of some molecules, discuss the efficiency, and finally summarize our techniques.

Time-Series Data Obtained from Real-Time Evolution

The essential in recent development of material depends on the density functional theory, which is based on the ground state, and successfully in describing the physical properties of materials. On the other hand, in describing the optical responses and the excitation spectra where the electronic excited states are involved, DFT is much less successful. However, this difficulty is, in principle, solved by the extension of DFT to time-dependence, e.g., TDDFT, which was established by Runge and Gross [7]. In analogy to the time-independent case, the TDDFT equation of motion coupled with pseudopotentials is given by

$$H\psi_k(\mathbf{r},t)=i\frac{\partial}{\partial t}\psi_k(\mathbf{r},t), \quad (1)$$

$$H=-\frac{1}{2}\nabla^2+V_{ps}(\mathbf{r},t)+V_H(\mathbf{r},t)+V_{XC}(\rho(\mathbf{r},t))+V_{ext}(\mathbf{r},t), \quad (2)$$

where V_{ps} ion is an ionic pseudopotential, V_H is the Hartree potential, and V_{XC} is the exchange-correlation potential. Since the exact time-dependent xc kernel is not known, the originally nonlocal time-dependent xc kernel is replaced with a time-independent local one. This is reasonable when the density varies slowly

with time. This approximation allows the use of a standard local ground-state xc functional in the TDDFT frame work. The Hartree and exchange-correlation potentials can be determined from the electronic charge density, $\rho(\mathbf{r}, t) = \sum_j |\psi_j(\mathbf{r}, t)|^2$. The summation is over all occupied states j . The Hartree potential is determined by $\nabla^2 V_H = -4\pi\rho$, and as the xc potential V_{XC} , the usual local density approximation (LDA) is used in our study. For the ionic potential, we employ the pseudopotential V_{ps} in the separable form so that the only valence electrons are considered. Prior to the calculation of optical responses, we first obtain the optimized electronic structure. Then, we apply an external field $V_{ext} = -k\delta(t)z$ to the system as a perturbation and follow the linear responses of the system in real time. The time dependent wave function is given by $\psi(t) = \exp[-iHt] \psi(0)$, with the initial wave function $\tilde{\psi}$ at $t = 0$, $\tilde{\psi}|_{t=0} = e^{ikz}\psi(0)$, where H is the Hamiltonian of the system, and k is a small wave number corresponding to the external perturbation in the z direction.

$$\mu(t) = \sum_i \langle \psi_i(\mathbf{r}, t) | \mathbf{r} | \psi_i(\mathbf{r}, t) \rangle \quad (3)$$

The polarizability $\alpha(\omega)$ is numerically calculated using the fast Fourier transformation (FT) of $\mu(t)$ as follows.

$$\alpha(\omega) = \frac{1}{k} \int dt \exp[-i\omega t] \mu(t) \quad (4)$$

The oscillator strength $S(\omega)$ is related to the imaginary part of the polarizability,

$$S(\omega) = \frac{2\omega}{\pi} \text{Im} \alpha(\omega). \quad (5)$$

In our approach, we use MEM in this procedure in eq. (4) and (5), considering the dynamic dipole moment $\mu(t)$ as a time series data. Figure 1 shows the dynamic dipole moment of benzene.

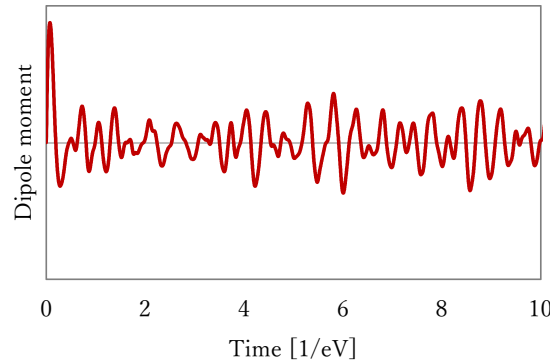


Figure 1. Example of dynamic dipole moment of benzene

Although this type of TDDFT is simple calculation, e.g., time-evolution of the ground state due to the external potential at $t = 0$, the effect is quite significant. Figure 2 shows the HOMO-LUMO gap of benzene, compared this TDDFT to the results from the usual density functional theory (DFT) with the local density approximation (LDA), the generalized gradient approximation (GGA), and the experiment. The simple LDA provides a small gap 5.04 eV. When we use GGA, the gap is slightly improved. TDDFT calculation give us the value 6.90 eV, which is comparable to the experimental value 6.94 eV.

Maximum Entropy Method

As shown in the previous section, the resolution of the FT absorption spectrum $S(\omega)$ is $\sim T^{-1}$, corresponding to the finite spectral bandwidth of the limited time series of $\mu(t)$, where $T = N\Delta t$ is the total evolution time. MEM, in contrast, estimates the full spectrum from the limited data based on information theory. The entropy in information theory has been recognized as a measure of uncertainty [8-10]. Any inferences made from incomplete information should use with the probability distribution which maximizes the entropy under the constraints of available information [11]. The present study is based on Burg's method

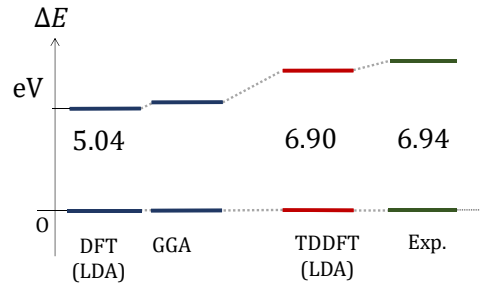


Figure 2. Comparison of the benzene band gap calculated by LDA, GGA, TDDFT that are referenced to experimental data

[12], where the dipole moment μ is assumed to be a random variable and the samples are given by TDDFT, $\mu_m = \mu(m\Delta t)$. The calculated autocorrelation C_m at the time lag m is

$$C_m = \frac{1}{N - |m|} \sum_{n=0}^{N-|m|-1} \mu_n^* \mu_{n+|m|}. \quad (6)$$

In Eq. (6), we use the general autocorrelation form in the case of the general time-series data. For $N \rightarrow \infty$, the Fourier transformation of the autocorrelation function is the power spectrum $P(\omega)$ [13] which is directly comparable to $S(\omega)$.

$$P(\omega)/\Delta t = \sum_{m=0}^{\infty} C_m \exp(-i\omega m \Delta t) \quad (7)$$

$$C_m = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi/\Delta t}^{\pi/\Delta t} P(\omega) \exp(i\omega m \Delta t) d\omega \quad (8)$$

When each random variable μ_n obeys the Gaussian distribution,

$$h \propto \int_{-\pi/\Delta t}^{\pi/\Delta t} \log P(\omega) d\omega \quad (9)$$

is maximized, and thus h is taken as the entropy. Conversely, under the constraints of Eq. (6) with the given value of Eq. (4), we find the value $\hat{P}(\omega)$ which maximizes Eq. (7). The solution is

$$\hat{P}(\omega)/\Delta t = \left| \frac{\beta}{1 + \sum_{k=1}^M a_k \exp(ik\omega \Delta t)} \right|^2, \quad (10)$$

where $M(\leq N)$ is the maximum number of $|m|$ in Eq. (4). The parameters a_k are the Lagrange multipliers which are the solution of the Yule-Walker equation

$$C_m = \sum_{k=1}^M a_k C_{m-k} + |\beta|^2 \delta_{m,0}, \quad (11)$$

or equivalently, the linear Toeplitz matrix equation [13],

$$\begin{pmatrix} C_0 & C_1 & \cdots & C_M \\ C_1 & C_0 & \cdots & C_{M-1} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ C_M & C_{M-1} & \cdots & C_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_M \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} |\beta|^2 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (12)$$

We adopt the Levinson-Durbin algorithm to solve Eq. (3) efficiently. The Yule-Walker equation Eq. (9) is also derived by the autoregressive model. We also extend the autocorrelation to the complex data, which is useful and explained in detail in the next section.

The periodicity of the signal is expressed by the lag in the autocorrelation. Figure 3(a) shows the relation of periodicity and the lag m schematically. The value at shorter lags shows the contribution from high frequencies, and the value at longer lags shows the contribution from low frequencies. Even though the information in the low energy region is important for the optical spectrum analysis, the value of the autocorrelation at larger lags can become quite small. In the autocorrelation calculation, the maximum size lag m is denoted by M . Of course, the effective value of M is restricted by the number of data N . Therefore, we require a sufficiently large N to obtain a reasonable spectral resolution in the low frequency region; the same as in the case of FT.

Signal Enhancement Technique

As a new MEM, we propose using a concatenated data set made from repeated raw data coupled with the phase shift so as to minimize the side effect of artificial periodicity. Our interests are in the lower energy region such as the energy gap. To emphasize the signal in this region, we need a larger lag M , which is the maximum lag of the autocorrelation. However, increasing M sometimes causes unphysical results such as peak splits and false peaks. In addition, the number M is limited by the total number of time steps N . To solve this difficulty, we repeat the raw data many times as shown in Fig. 3(b). The resolution in the lower energy region is attributed to the maximum lag M . With the repeated signal, the value of M may be selected at sufficiently large values without additional computations. With this procedure, we can save on computational costs.

At the concatenated point, of course, there is a phase jump for each frequency component, which is recognized as noise in the total signal. The side effect of phase jump may be added, for example, the peak shifts. To reduce side effects of the phase jump such as peak shifts, we introduced a phase shift at each concatenated data in the repeated data.

$$\mu(n) = \mu'(n) \exp(ik\phi), \quad (13)$$

where $\mu'(n)$ is the repeated raw data, and $\hat{\mu}(n)$ is the k -times repeated and concatenated data $\mu'(n)$ with an appropriate phase ϕ for the target frequency ($-\pi \leq \phi \leq \pi$). This introduction of the phase to the signal does not affect to the total power spectrum due to the definition used in Eq. (8). Of course, a different target frequency has a different phase. Since the phase ϕ is a constant value, it is necessary to choose the appropriate phase for the target frequency to minimize the side effects of the phase jump due to the concatenated repeated data.

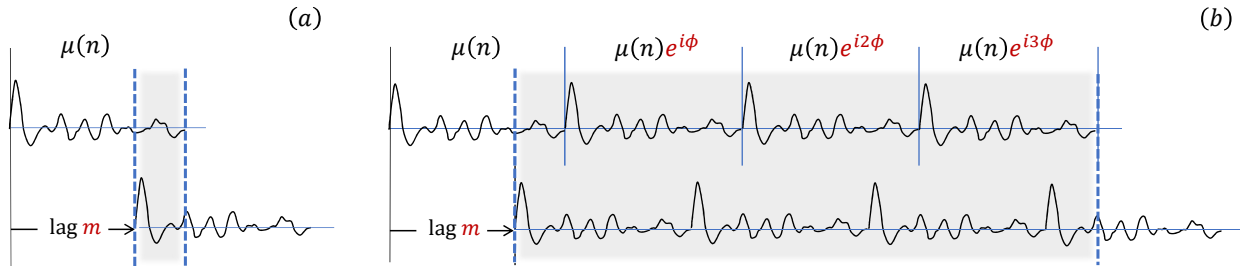


Figure 3. Conceptual image of the autocorrelation calculation for (a) the raw data, and (b) our concatenated data made from several-times repeated raw data together with the phase

Figure 4. shows the practical dynamic dipole moment $\hat{\mu}(n)$ that the three times concatenated data $N = 5000$, and the maximum lag $M = 1800$ with the phase shift $\phi = -0.25\pi$. Although this dipole moment is complex, we can calculate the autocorrelation using Eq. (6). The Yule-Walker equation does not change, and we solve eq. (12) as usual. The calculated spectrum $S(E)$ by our MEM method is shown in Fig. 5. In this case, the target peak or the lowest energy peak is the first peak around 7.5eV, which is shown as an arrow in Fig. 5(a). In Fig. 5, we compare the spectrum $S(E)$ obtained from the non-repeated data $N = 5000$, and the concatenated data $N = 5000 \times 100$ together with an appropriate phase $\phi = -0.25\pi$, and that concatenated data in out of phase $\phi = \pi$. In all cases, we use the maximum lag $M = 1800$. For the benzene molecule, this time step seemingly provides a good resolution so as to see the first peak clearly.

However, there are differences due to the side effect of phase jump as mentioned above. In Fig. 5(b), the first peak in detail is described in the region from 6.5 eV to 7.5 eV. Our method with the matched phase provides the good resolution compared with that of a conventional MEM. On the other hand, the result of the mismatched phase provides the different peak position and the broad peak. To obtain a good spectrum, corresponding to the energy gap peak, we have to find the matched phase. If we choose the mismatched phase for the target peak, the position of that peak shifts, and the strength decreases. From this point of view, we can select the better phase both to make the target peak sharp and to maximize the strength.

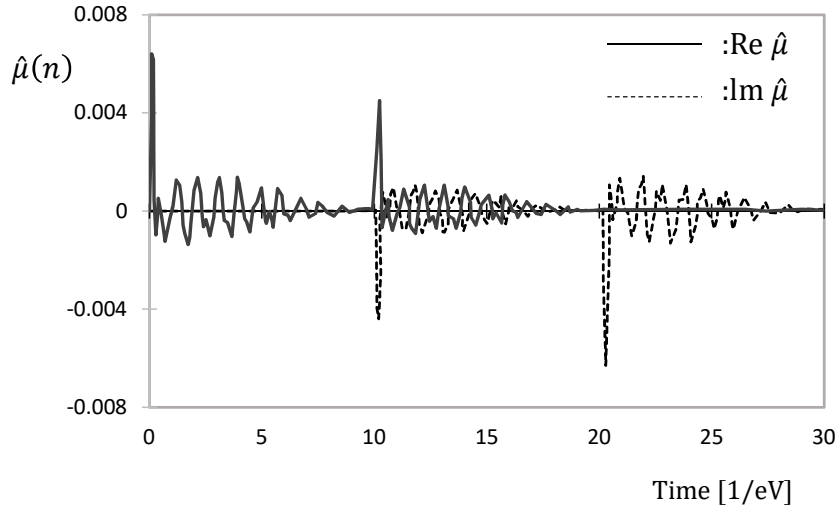


Figure 4. The Concatenated repeated raw data $N = 5000 \times 3$, and $M = 1800$ of Benzene dipole moment together with the phase $\phi = -0.25\pi$. The solid and the dotted line shows the real and imaginary part, respectively

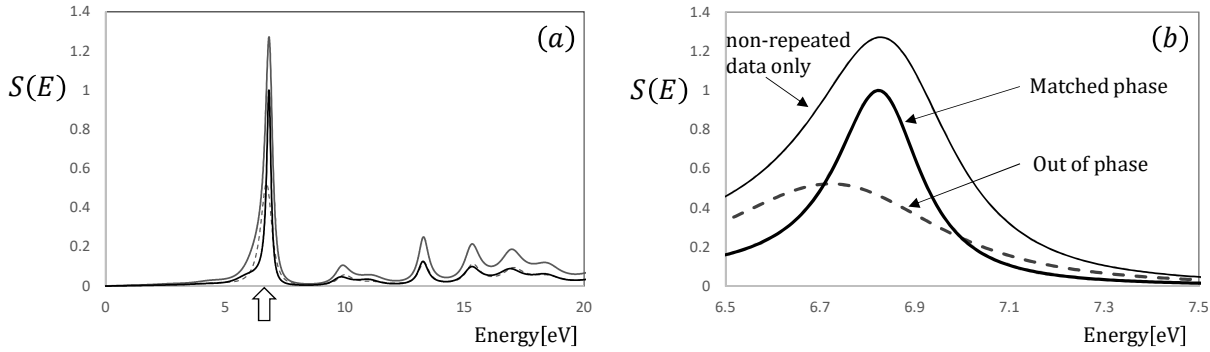


Figure 5. Comparison of the spectrum each condition: Thin solid line shows the MEM spectrum with non-repeated data $N = 5000$; Thick line shows the spectrum with the repeated data $N = 5000 \times 100$ and matched phase, $\phi = -0.25\pi$; Dotted line is the spectrum with the repeated data $N = 5000 \times 100$ and out of phase $\phi = \pi$

Our method with the matched phase provides the good resolution compared with that of a conventional MEM. On the other hand, the result of the mismatched phase provides the different peak position and the broad peak. To obtain a good spectrum, corresponding to the band gap peak, we have to find the matched phase. Spectrum our MEM comparison obtained from the time-series data for benzene, which was made using real-time TDDFT. (a) Real time evolution up to $N = 20000$ for FT. (b) Four times repeated data of the dipole moment with $N = 5000 \times 4$. (c) The data in panel (b) together with the phase $\phi = 0.25\pi$. The solid line is the real part of the data, and the dashed line is the imaginary part of the data.

Results for small and mediumsize molecules

As a simple example to confirm the efficiency of our proposed method, we applied our MEM to the analysis of benzene, naphthalene, anthracene, and tetracene. The molecular structure of these molecules is based on the ground state. The time evolution is carried out according to real-time TDDFT [14]. The spectrum $S(\omega)$ is calculated from the time-series data in our MEM technique. The results are shown in Fig. 6, where the solid line is meant for the result for benzene, the dashed line is that for naphthalene, the dash-dotted line is that for anthracene, and the dotted line is that for tetracene. These spectra are normalized by the intensity at the first peak. Figure 6(a) shows the results of the improved MEM. The parameters (M and ϕ) of our MEM are $M = 1800$ and $\phi = -0.25\pi$ for the analysis of benzene, $M = 2500$ and $\phi = -0.20\pi$ for that of naphthalene, $M = 2000$ and $\phi = -0.23\pi$ for that of anthracene, and $M = 3000$ and $\phi = -0.21\pi$ for that of tetracene. For both MEM calculations, the same number of the time steps, $N = 10000 \times 100$, is used. Figure 6(b) shows the results of FT with $N = 10000$. Our method provides good resolution compared with that of FT. In addition, we can see a clear spectrum in comparison to FT. This is one feature of our MEM.

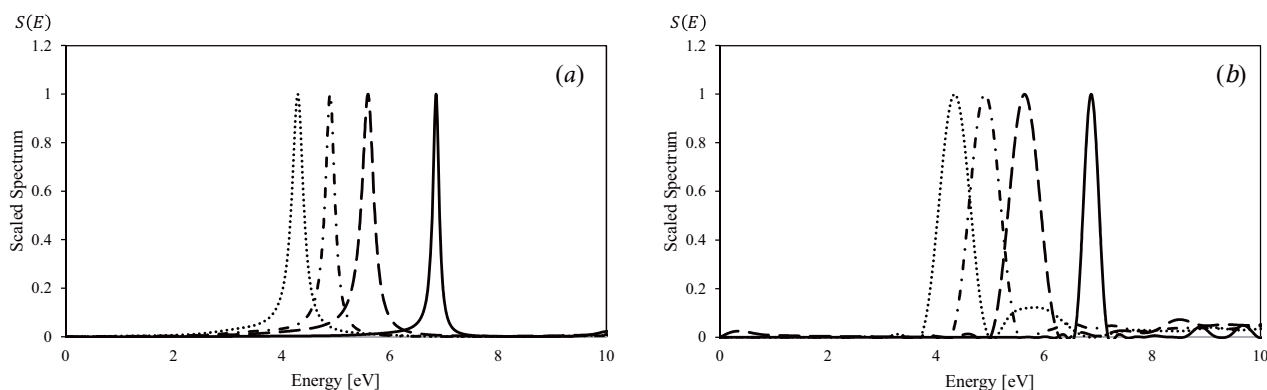


Figure 6. Comparison of the improved MEM and FT spectra for benzene (solid line), naphthalene (dashed line), anthracene (dash-dotted line) and tetracene (dotted line). (a) Results of our MEM using $N = 10000 \times 100$ with ($M = 1800, \phi = -0.25\pi$), for benzene, ($M = 2500, \phi = -0.20\pi$), for naphthalene, ($M = 2000, \phi = -0.23\pi$) for anthracene, and ($M = 3000, \phi = -0.21\pi$) for tetracene. (b) Results of FT with $N = 10000$. All the spectra are normalized at the first low energy peak

Poly(9,9-dialkyl-uorene) and their substituted derivatives are used as organic LED material and are expected to be basic materials for blue emission LEDs. Their electronic structures have been extensively studied [15]. We employed the oligomer of fluorene (oligo-FL) with $n = 8$ and performed the MEM calculation. The molecule size is fairly large; therefore, then the calculation for each step is quite expensive. It takes a long time to perform the calculation to obtain the low energy part of the spectrum. If we can save on the calculation cost when calculating the lower energy part of the spectrum, our method will be considered effective. We applied our MEM to this signal analysis. Figure 7 shows a comparison of the absorption spectra using four different methods. The solid line shows the result of our MEM with $N = 5000 \times 100$, $M = 2500$ and $\phi = 0.25\pi$ the dashed line is that of FT for $N = 20000$, the dash-dotted line is our conventional MEM spectrum with just the real time steps $N = 5000$ and $M = 2500$, and the dotted line is that of MEM with $N = 5000 \times 100$ and $M = 2500$. These spectra are normalized at the second low energy peak, which is relevant to the absorption of a fluorene unit.

FT (the dashed line) and the simple MEM (the dash-dotted line) provide a broad peak at the bandgap area. With only the repeated signal (the solid and dashed lines), the strength of the first peak is emphasized. Without a phase shift, we can observe that the peak position shifts due to the side effect of the phase jump [6]. However, we can obtain a clear first peak using our new method (the solid line). In this case, we choose the matched phase corresponding to the first peak. Therefore, the position of the second peak differs from those in the other methods. (Note that the normalization of the signal was done at the second peak.) If we choose the mismatched phase for the target peak, the position of the peak shifts and the strength, decreases as we mentioned above. The bandgap peak at 2.53 eV for our MEM may correspond to the experimentally observed peak at 3.56 eV for poly-FL. This discrepancy is due to an inherent problem in DFT.

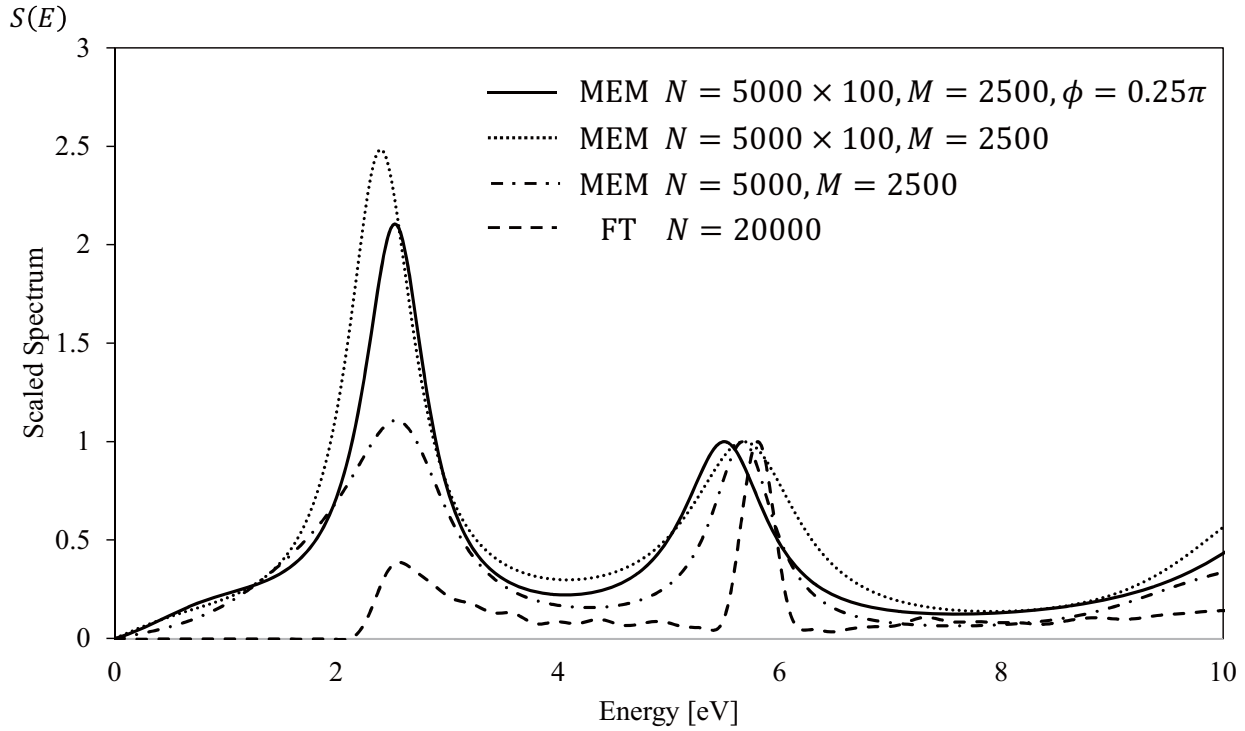


Figure 7. Comparison of the absorption spectrum for oligo-fluorene with $n=8$. The dashed line is the result of FT with $N = 20000$, the dash-dot line is that of MEM with $N = 5000$, the dotted line is the that of MEM with repeated data $N = 5000 \times 100$, and the solid line is that of our MEM with $N = 5000 \times 100$, $M = 2500$ and $\phi = 0.25\pi$. Spectra are normalized at the second low energy peak

Discussions

In our MEM, there are two important issues. One is the use of a concatenated data set made from repeated raw data. The other is the introduction of the phase to minimize the artificial periodicity. In MEM, the periodicity is on the autocorrelation function. The small lag m and large lag m represent information of higher and lower frequencies, respectively. If we have infinite time-series data, there is no difference between the signal strength in high and low frequency. However, we have is finite time-series data. Naturally, the information of the lower frequencies decreases compared to that of the higher frequencies. The interests are, on the other hand, in the low energy region such as energy gaps in the optical material properties.

Figure 8 shows the magnitude of the Yule-Walker equation eq. (12). In the traditional MEM, the magnitude of the diagonal element is the largest. Then, that of the off diagonal elements decreases as shown in Fig. 8(a). When we use the concatenated made from repeated raw data, we can see the higher-order autocorrelation functions (around the upper right and lower left corners of the matrix) clearly contain a lot of long-period information as expressed in Fig. 8(b).

The selection of the appropriate phase is depend on the target peak. As we see the spectrum in Fig. 7. In our MEM ($N=5000 \times 100$) using just repeated data, the intensity of the first peak is the most developed. However, the peak position is shifted. On the other hand, in our proposed method ($N=5000 \times 100$, and $\phi = 0.25\pi$), there is no deviation in the position of the first peak, and we can obtain the good resolution. Although the intensity is different, it is a sharper developed peak than the FT of $N = 20000$. In Fig. 7, the phase ϕ was decided for the largest first peak. Naturally, the value of ϕ is different at the second peak. If an inappropriate ϕ is used in this calculation, the peak will be out of position, and the intensity will decrease. Good example is the spectrum around the second peak. The intensities of the second peak are normalized for all cases. We can see that only the second peak position has changed, because the phase was selected for the first peak.

In addition, our MEM is not always work well for target peak. With this method for the spectrum analysis, we cannot obtain the low energy component which is not included in the data. We have to calculate a certain level of the time evolution until the information of the low energy part is obtained.

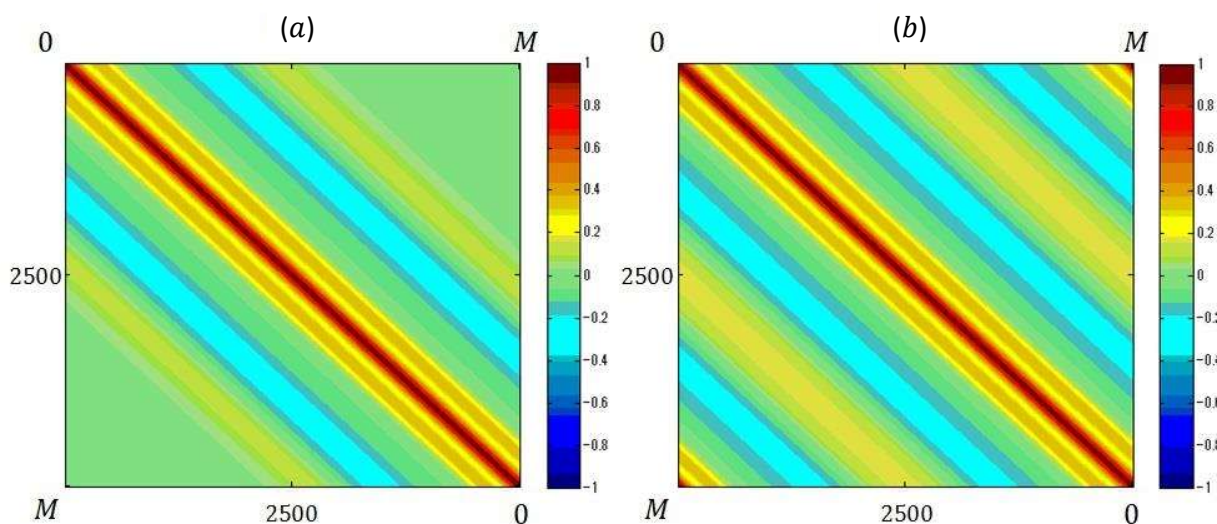


Figure 8. The effect of repeated data on long-period components. The magnitude of each matrix elements of the coefficient matrix in eq. (12) is represented by a color distribution. (a) The results of $N = 5000$, and (b) the results of $N = 5000 \times 100$ are shown. In both cases, $M = 4999$. All elements are normalized by the diagonal element value (autocorrelation function with lag 0, C_0), which is expressed as dark red

Summary

We employed MEM to obtain optical spectra of molecules, and the spectral resolution was quite improved, which is better than that of FT with the same number or total time steps. As a new aspect, we introduced the use of repeated the same signal together with the phase to make apparently long data. The resolution of the spectrum is dependent on the total number of time steps N and the autocorrelation lag M . A longer time lag is involved, the spectrum is efficiently enhanced in the lower frequency region. We obtained quite better resolutions for target peak without adding practical machine time. This means that we can save our calculation cost efficiently.

REFERENCES

1. Sakurai T. Eleven-Year Solar Cycle Periodicity in Sky Brightness Observed at Norikura, Japan. *Earth Planets Space*. 2002;54(2):153–157. DOI: 10.1186/BF03351715.
2. Chelikowsky J. R., Troullier N., Wu K., Saad Y. Higher-Order Finite-Difference Pseudopotential Method: an Application to Diatomic Molecules. *Physical Review B*. 1994;50(16):11355–11364. DOI: 10.1103/PhysRevB.50.11355.
3. Yabana K., Bertisch G. F. Time-Dependent Local-Density Approximation in Real Time. *Physical Review B*. 1996;54(7):4484–4487. DOI: 10.1103/PhysRevB.54.4484.
4. Burg J. P. A New Analysis Technique for Time Series Data. NATO Advanced Study Institute on Signal Processing. 1968;15-0. Enschede, Netherlands.
5. Toogoshi M., Kato M., Kano S. S., Zempo Y. Optical Spectrum Analysis of Real-Time TDDFT Using the Maximum Entropy Method. *Journal of Physics: Conference Series*. 2014;510:012027. DOI: 10.1088/1742-6596/510/1/012027.
6. Toogoshi M., Kano S., Zempo Y. Improved Maximum Entropy Method applied to Real-Time Time-Dependent Density Functional Theory. *Journal of Physics: Conference Series*. 2017;905:012006. DOI: 10.1088/1742-6596/905/1/012006.
7. Runge E., Gross E. K. U. Density-Functional Theory for Time-Dependent Systems. *Physical Review Letters*. 1984;52(12):997–1000. DOI: 10.1103/PhysRevLett.52.997.
8. Shannon C. E. A Mathematical Theory of Communication. *The Bell System Technical Journal*. 1948;27(3):379–423. DOI: 10.1002/j.1538-7305.1948.tb01338.x.
9. Shannon C. E. A Mathematical Theory of Communication. *The Bell System Technical Journal*. 1948;27(4):623–656. DOI: 10.1002/j.1538-7305.1948.tb00917.x.

10. Jaynes E. T. Information Theory and Statistical Mechanics. *Physical Review*. 1957;106(4):620–630. DOI: 10.1103/PhysRev.106.620.
11. Jaynes E. T. On the Rationale of Maximum-Entropy Methods. *Proceedings of the IEEE*. 1982;70(9):939–952. DOI: 10.1109/PROC.1982.12425.
12. Haykin S., Kesler S. Prediction-Error Filtering and Maximum-Entropy Spectral Estimation. Haykin S. (eds) *Nonlinear Methods of Spectral Analysis. Topics in Applied Physics*. 1979;34:9–72. Springer, Berlin, Heidelberg. DOI: 10.1007/3-540-12386-5_9.
13. Kauppinen J. K., Maffat D. F., Hollberg M. R., Mantch H. A. New Line-Narrowing Procedure Based on Fourier Self-Deconvolution, Maximum Entropy, and Linear Prediction. *Applied Spectroscopy*. 1991;45(3):411–416. DOI: 10.1366/0003702914337155.
14. Zempo Y., Akino., Ishida M., Ishitobi M., Kurita Y. Optical Properties in Conjugated Polymers. *Journal of Physics: Condensed Matter*. 2008;20(6):064231. DOI: 10.1088/0953-8984/20/6/064231.
15. Hummer K., Puschnig P., Sagmeister S., Ambrosch-Draxl C. Ab-Initio Study on the Excitation Binding Energies in Organic Semiconductors. *Modern Physics Letters B*. 2006;20(6):261–280. DOI: 10.1142/S0217984906010603.

DOI: 10.51790/2712-9942-2021-2-2-6

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ В ДЕФОРМИРУЕМОЙ СРЕДЕ С ПРИМЕНЕНИЕМ СЕТОЧНО-ХАРАКТЕРИСТИЧЕСКОГО МЕТОДА

И. Б. Петров

Московский физико-технический институт, г. Долгопрудный, Московская обл., Российская Федерация
ORCID: <http://orcid.org/0000-0003-3978-9072>, petrov@mipt.ru

Аннотация: существует значительное количество прикладных задач, для решения которых применяется математическое моделирование динамических процессов в деформируемых средах. К таким задачам относят моделирование распространения упругих волн в геологических средах, в том числе с учетом ледовых образований, их рассеяния на зонах трещиноватости. Актуальность этих постановок обусловлена важностью решения обратных задач сейсмической разведки, обработки данных сейсмической разведки с целью уточнения запасов углеводородов и определения расположения углеводородов и других полезных ископаемых. Поэтому приобретает важность разработка высокоточных численных методов, позволяющих моделировать упругие волны в деформируемых средах. Одним из этих методов является сеточно-характеристический численный метод, примененный в данной работе. Этот численный метод применяется для решения прямых задач, то есть для расчета распространения упругих волн при известных параметрах рассматриваемой среды. А для решения обратной задачи по восстановлению параметров геологической среды по данным сейсмической разведки можно применять нейронные сети, для обучения которых можно использовать многократное решение прямых задач сеточно-характеристическим методом. В данной работе приведены примеры решения разнообразных прямых задач по распространению упругих волн в неоднородных геологических средах, в том числе в зоне Арктики, а также представлена постановка задачи по обучению нейронных сетей и графики, показывающие эффективность их обучения с использованием двух различных подходов.

Ключевые слова: вычислительные эксперименты, компьютерное моделирование, сеточно-характеристический метод, сейсмическая разведка, упругие волны.

Благодарности: работа выполнена в рамках проекта Российского научного фонда № 19-11-00023.

Для цитирования: Петров И. Б. Математическое моделирование динамических процессов в деформируемой среде с применением сеточно-характеристического метода. *Успехи кибернетики*. 2021;2(2):74–81. DOI: 10.51790/2712-9942-2021-2-2-6.

SIMULATION OF DYNAMIC PROCESSES IN DEFORMABLE MEDIUM WITH THE GRID-CHARACTERISTIC APPROACH

Igor B. Petrov

Moscow Institute of Physics and Technology, Dolgoprudny, Moscow Region, Russian Federation
ORCID: <http://orcid.org/0000-0003-3978-9072>, petrov@mipt.ru

Abstract: many problems can be solved with the simulation of dynamic processes in deformable media. They are the simulation of elastic wave propagation in rocks including ice formations, and wave scattering on rock-fracture zones. Such studies are important for solving inverse problems of seismic exploration and seismic data processing to get a better estimation of hydrocarbon reserves, locate hydrocarbons and other minerals. Therefore, it is necessary to develop high-precision numerical methods used to simulate elastic waves in deformable media. One of such methods is the grid-characteristic approach used in this work. It is suitable for solving direct problems, i.e., to analyze the propagation of elastic waves in a medium with known properties. Neural networks can be applied to solve the inverse problem: reconstructing the geology from seismic survey data. Multiple solving of direct problems by the grid-characteristic approach is used for network training. This paper contains some examples of solving a range of direct problems on the elastic wave propagation in heterogeneous rocks, also in the Arctic zone, and the problem statement for training neural networks and graphs is proposed to demonstrate the efficiency of training with two approaches.

Keywords: computational experiments, computer simulation, grid-characteristic approach, seismic exploration, elastic waves.

Acknowledgements: this work is supported by the Russian Science Foundation, project No. 19-11-00023.

Cite this article: Petrov I. B. Simulation of Dynamic Processes in Deformable Medium with the Grid-Characteristic Approach. *Russian Journal of Cybernetics*. 2021;2(2):74–81. DOI: 10.51790/2712-9942-2021-2-2-6.

Введение

Сеточно-характеристический численный метод успешно применяется для решения различных задач по моделированию распространения упругих волн в деформируемых средах. К ним можно отнести задачи сейсмической разведки [1–3], в том числе пористых сред [4], ультразвуковой медицины [5], сейсмостойкости сооружений [6, 7], безопасности железнодорожных путей [8], исследования решений краевых задач упругого и акустического волновых уравнений [9].

Были разработаны различные модификации сеточно-характеристического метода: на структурированных равномерных сетках [6–8], структурированных гексаэдральных сетках [5], треугольных и тетраэдральных сетках [10], с явным выделением границ раздела сред [5, 11] и с заданием параметров упругих сред в каждом узле расчетной сетки [2], с использованием компактных разностных схем [12] и высокопроизводительных вычислительных систем [11].

В данной работе рассматриваются двумерные и трехмерные постановки задач, структурированные равномерные расчетные сетки, явное выделение границ раздела сред и схемы со сквозным счетом и заданием упругих параметров в каждом узле.

Математическая модель

Рассматривается гиперболическая система уравнений, описывающая распространение упругих волн:

$$\rho \mathbf{v}_t = (\nabla \cdot \mathbf{T})^T, \quad (1)$$

$$\mathbf{T}_t = \lambda (\nabla \cdot \mathbf{v}) \mathbf{I} + \mu (\nabla \otimes \mathbf{v} + (\nabla \otimes \mathbf{v})^T), \quad (2)$$

где ρ — плотность, $\mathbf{T}$ — симметричный тензор напряжений Коши второго ранга, $\mathbf{v}$ — скорость (производная смещения по времени), λ, μ — параметры Ламе, связанные следующим образом со скоростями распространения продольных и поперечных волн:

$$c_p = \left(\rho^{-1} (\lambda + 2\mu) \right)^{1/2}, \quad (3)$$

$$c_s = \left(\rho^{-1} \mu \right)^{1/2}. \quad (4)$$

Система уравнений (1), (2) может быть представлена в следующем виде в трехмерном случае:

$$\mathbf{q}_t + \mathbf{A}_1 \mathbf{q}_x + \mathbf{A}_2 \mathbf{q}_y + \mathbf{A}_3 \mathbf{q}_z = 0. \quad (5)$$

Далее проводится расщепление по пространственным координатам и получаются системы уравнений вида:

$$\mathbf{q}_t + \mathbf{A}_1 \mathbf{q}_x = 0. \quad (6)$$

С помощью представления матрицы $\mathbf{A}_1 = (\mathbf{\Omega}_1)^{-1} \mathbf{\Lambda}_1 \mathbf{\Omega}_1$ систему уравнений (6) можно свести к системе независимых уравнений переноса, каждое из которых можно решить с помощью соответствующей разностной схемы и совершить обратный переход к вектор-функции неизвестных $\mathbf{q}$.

Численное решение задач сейсмической разведки

Распространение сейсмических волн моделировалось в 2D-модели Marmousi2. В целом, глубина составляет 3,5 км, а ширина — 17 км. Модель содержит 199 поверхностей разрыва сред, что делает ее более сложной, чем ее предшественник (Marmousi). Дополнительно водный слой увеличен до 450 метров. Эта модель представляет собой упругую модель с плотностью в диапазоне 1010–2627 кг/м³,

скоростью продольных волн в диапазоне 1028–4700 м/с и скоростью поперечных волн в диапазоне 1–2802 м/с. Слой воды описывался очень низким значением скорости поперечных волн. Использовалась прямоугольная сетка с пространственными шагами 5 м × 5 м, 3401 × 701 узлов. В каждом узле хранилось три упругих параметра (плотность и скорости продольных и поперечных волн). Для выполнения условия устойчивости шаг по времени равнялся 1 мс, всего было выполнено 5000 шагов по времени для моделирования 5 секунд физического времени распространения упругих волн. Для решения независимых уравнений переноса на широком шаблоне была применена схема Русанова. Волновые поля в разные моменты времени приведены на рисунках 1, 2.

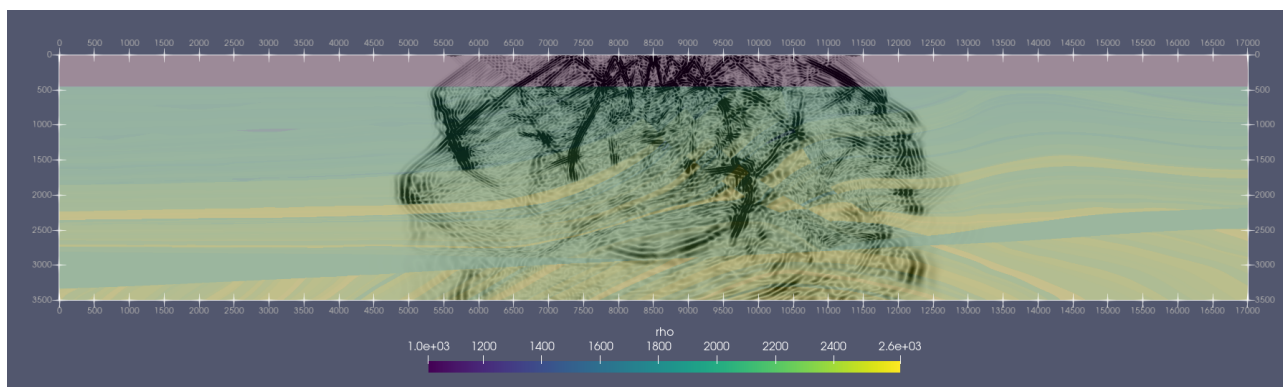


Рис. 1. Волновое поле сейсмического отклика от геологической модели *Marmousi2*

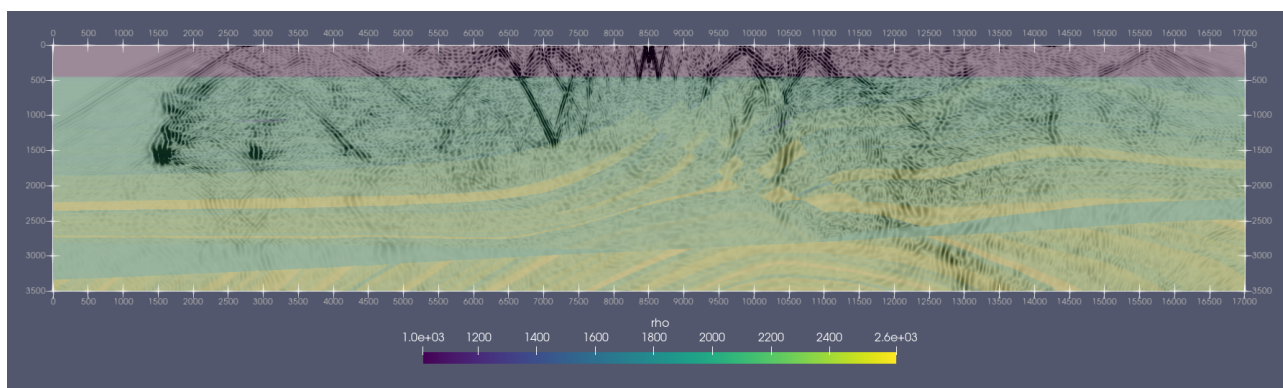


Рис. 2. Волновое поле сейсмического отклика от геологической модели *Marmousi2*, более поздний момент времени

Также были проведены расчеты для трехмерной модели SEG_C3_NA. Распределение скорости продольных волн приведено на рисунке 3, а волновое поле представлено на рисунках 4, 5 в различные моменты времени.

На рисунке 6 изображен отклик от трещины, возникшей в результате гидроразрыва пласта. В качестве источника волн рассматривался естественный подземный периодический источник — «микросейсмы». Модель трещины — бесконечно тонкая трещина.

На рисунке 7 рассмотрено распространение кратных волн в слое льда (модель состоит из льда, воды и грунта, источник в центре на поверхности с частотой 100 Гц), момент времени $t = 0.05$ сек.

Применение сеточно-характеристического метода для обучения нейронных сетей

Как известно, для обучения нейронных сетей необходимо обеспечить достаточное количество данных. Если целью обучения нейронной сети является обработка сейсмограмм, полученных в ходе сейсмической разведки трещиноватых сред, то одним из возможных вариантов ее обучения является расчет большого количества прямых задач с помощью численного моделирования сеточно-характеристическим методом. Рассмотрим массив монетообразных трещин, приведенный на рисунке 8.

Строго говоря, рассматривается скопление более значительного количества монетообразных

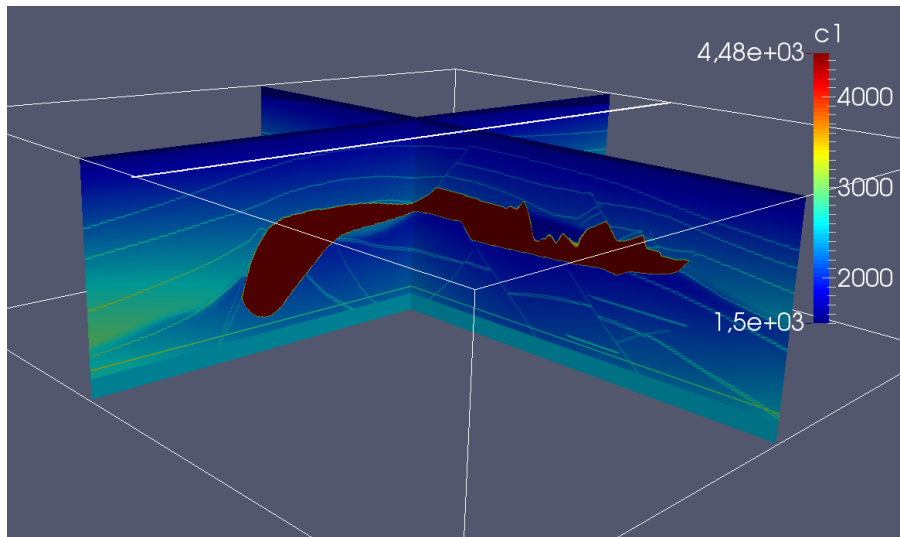


Рис. 3. Модель *SEG_C3_NA*, распределение скорости продольных волн

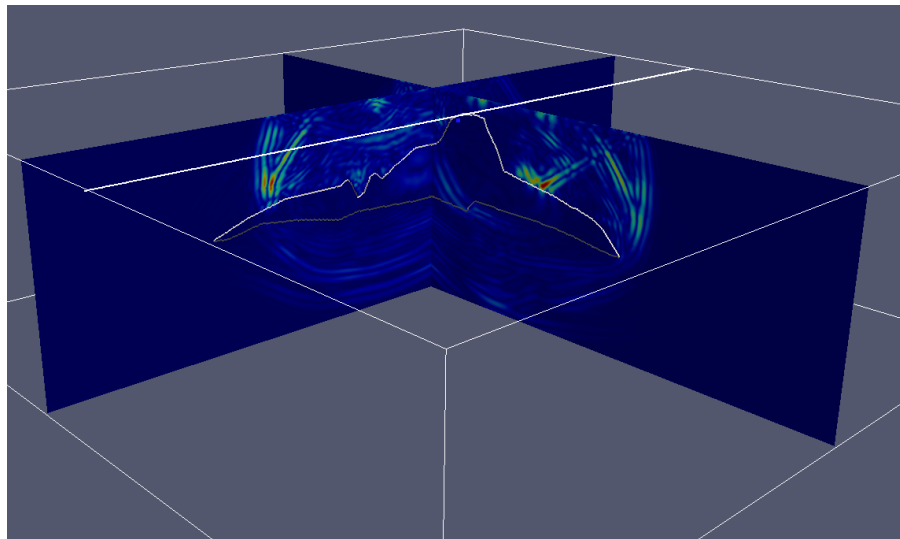


Рис. 4. Модель *SEG_C3_NA*, волновое поле

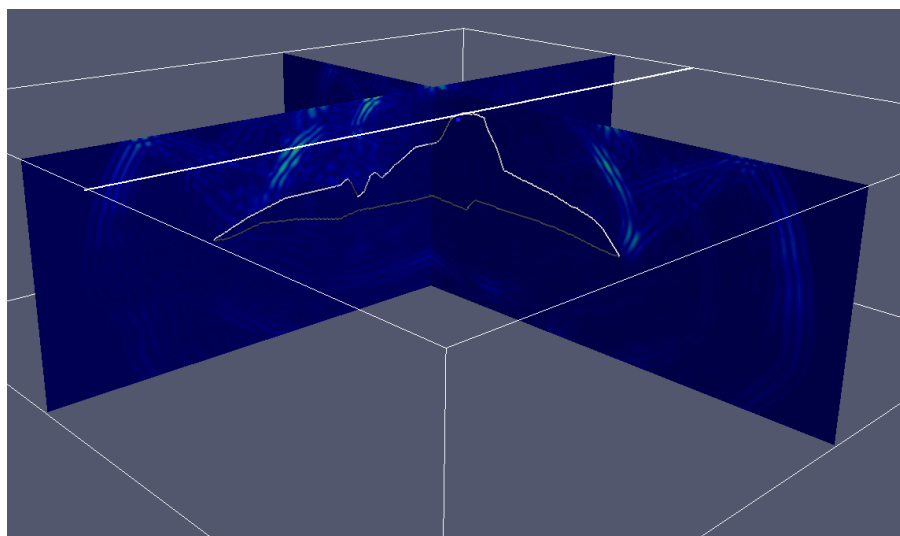


Рис. 5. Модель *SEG_C3_NA*, волновое поле, более поздний момент времени

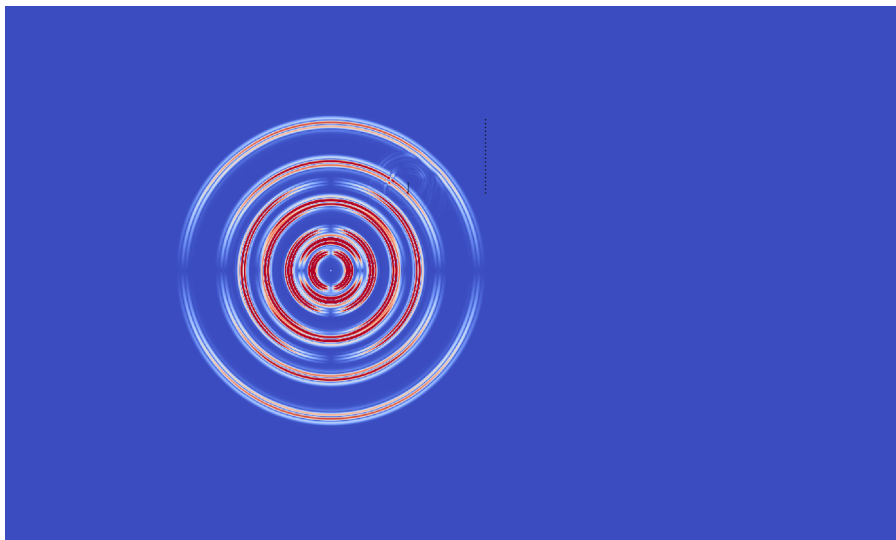


Рис. 6. Сейсмический отклик от трещины, возникшей в результате гидроразрыва пласта



Рис. 7. Распространение кратных волн в слое льда

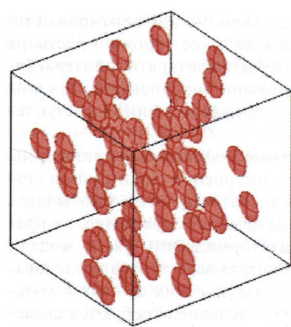


Рис. 8. Массив монетообразных трещин

трещин, а именно трехмерная модель, заполненная монетообразными трещинами с диаметром трещины 8 м, рисунок 9. Блок с трещинами располагается на глубине 1500 м.

Рассчитанные сейсмограммы компонент скорости X, Y, Z приведены на рисунке 10.

При обучении нейронной сети рассматривался следующий функционал средней абсолютной ошибки MAE:

$$MAE = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |y_i - \hat{y}|. \quad (7)$$

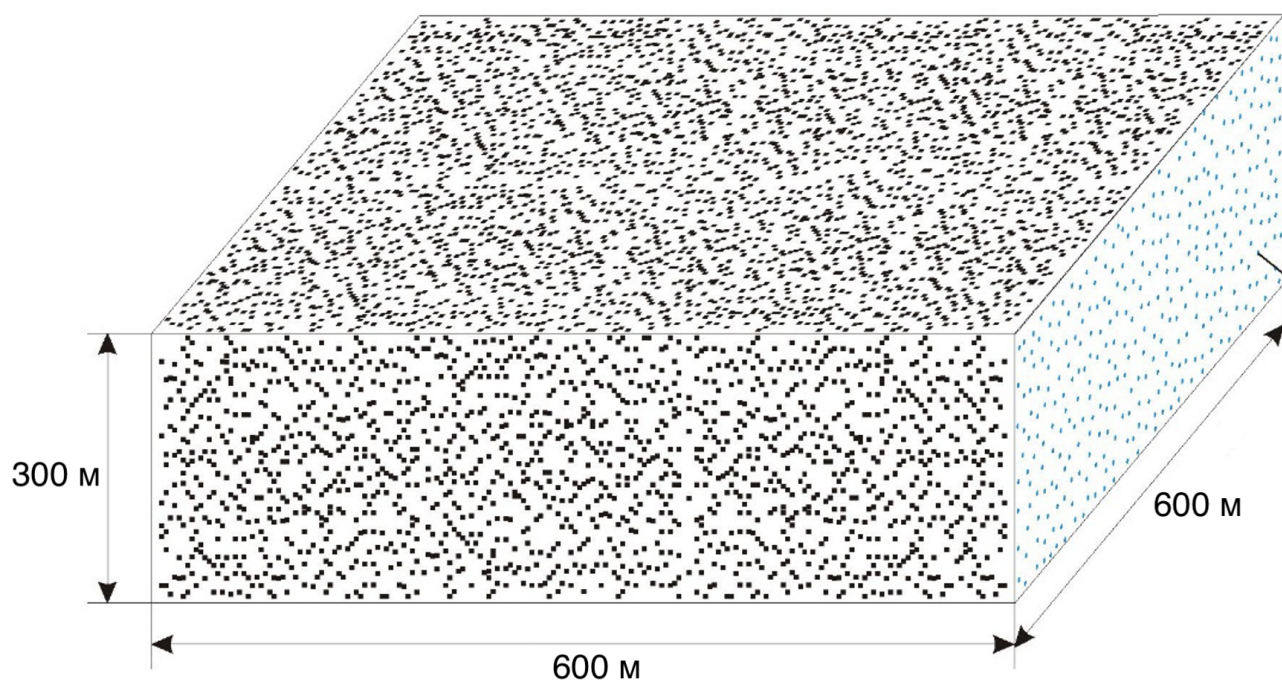


Рис. 9. Трехмерная модель, заполненная монетообразными трещинами

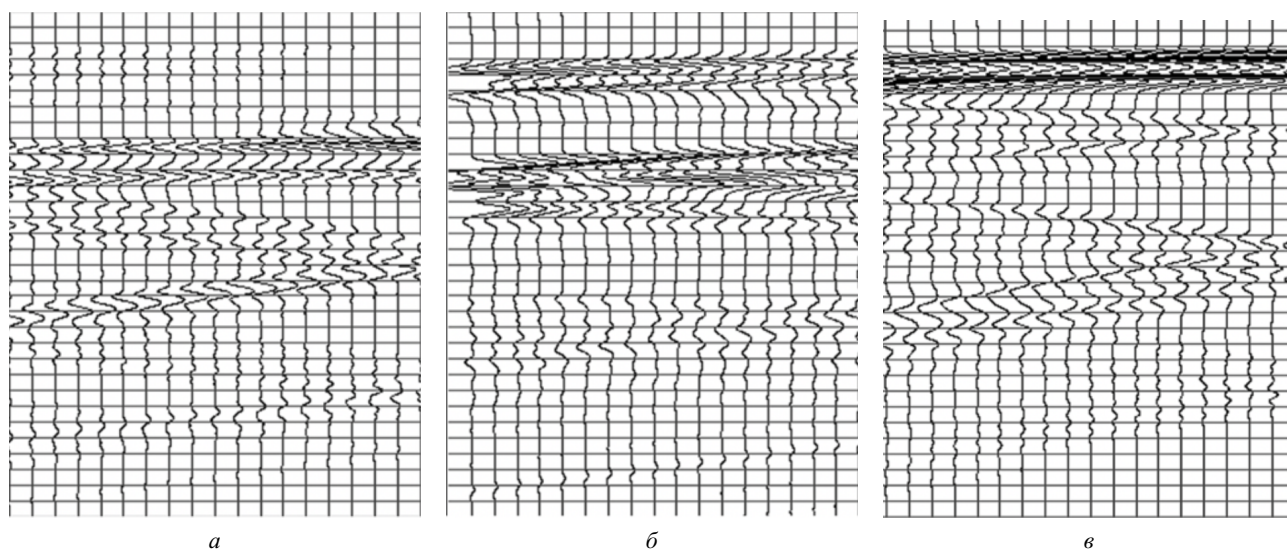


Рис. 10. Сейсмограммы отклика упругих волн от кластера монетообразных трещин: а — X -компонента скорости; б — Y -компонента скорости; в — Z -компонента скорости

Использовались два подхода. В подходе 1 обучающая и валидационная выборки состоят из данных двух компонент скоростей. В подходе 2 помимо значений компонент скоростей в элементе выборки присутствует их частотный спектр (Фурье-преобразование). Графики MAE для данных двух подходов приведены на рисунке 11.

Заключение

Сеточно-характеристический метод успешно применим для решения широкого класса задач математического моделирования динамических процессов в деформируемой среде, некоторые из которых рассмотрены в данной работе, включая актуальные задачи сейсмической разведки и обучения нейронных сетей.



Рис. 11. Сопоставление графиков функционала MAE для валидационной выборки в зависимости от эпохи обучения. Синий — подход 1, оранжевый — подход 2

ЛИТЕРАТУРА

1. Stognii P. V., Khokhlov N. I. Investigation of Models with Fluid- and Gas-Filled Fractures with the Help of the Grid-Characteristic Method. *Smart Innovation, Systems and Technologies*. 2021;214:125–136. DOI: 10.1007/978-981-33-4709-0_11.
2. Muratov M. V., Derbysheva T. N. Mathematical Modeling of Spatial Wave Processes in Fractured Seismic Media. *Smart Innovation, Systems and Technologies*. 2021;214:115–124. DOI: 10.1007/978-981-33-4709-0_10.
3. Khokhlov N., Stognii P. Novel Approach to Modeling the Seismic Waves in the Areas with Complex Fractured Geological Structures. *Minerals*. 2020;10(2):122. DOI: 10.3390/min10020122.
4. Golubev V., Shevchenko A., Petrov I. Simulation of Seismic Wave Propagation in a Multicomponent Oil Deposit Model. *International Journal of Applied Mechanics* 2020;12(8):2050084. DOI: 10.1142/S1758825120500842.
5. Favorskaya A. V. Simulation of the Human Head Ultrasound Study by Grid-Characteristic Method on Analytically Generated Curved Meshes. *Smart Innovation, Systems and Technologies*. 2021;214:249–263. DOI: 10.1007/978-981-33-4709-0_21.
6. Favorskaya A., Golubev V. Study the Elastic Waves Propagation in Multistory Buildings, Taking into Account Dynamic Destruction. *Smart Innovation, Systems and Technologies*. 2020;193:189–199. DOI: 10.1007/978-981-15-5925-9_16.
7. Favorskaya A., Golubev V., Khokhlov N. Two Approaches to the Calculation of Air Subdomains: Theoretical Estimation and Practical Results. *Procedia Computer Science*. 2018;126:1082–1090. DOI: 10.1016/j.procs.2018.08.045.
8. Favorskaya A., Khokhlov N. Modeling the Impact of Wheelsets with Flat Spots on a Railway Track. *Procedia Computer Science*. 2018;126:1100–1109. DOI: 10.1016/j.procs.2018.08.047.
9. Favorskaya A., Petrov I. A Novel Method for Investigation of Acoustic and Elastic Wave Phenomena Using Numerical Experiments. *Theoretical and Applied Mechanics Letters*. 2020;10(5):307–314. DOI: 10.1016/j.taml.2020.01.040.

10. Muratov M. V., Petrov I. B., Sannikov A. V., Favorskaya A. V. Grid-Characteristic Method on Unstructured Tetrahedral Meshes. *Computational Mathematics and Mathematical Physics*. 2014;54(5):837–847. DOI: 10.1134/S096554251405011X.
11. Ivanov A. M., Khokhlov N. I. Parallel Implementation of the Grid-Characteristic Method in the Case of Explicit Contact Boundaries. *Computer Research and Modeling*. 2018;10(5):667–678. DOI: 10.20537/2076-7633-2018-10-5-667-678.
12. Golubev V. I., Shevchenko A. V., Khokhlov N. I., Nikitin I. S. Numerical Investigation of Compact Grid-Characteristic Schemes for Acoustic Problems. *Journal of Physics: Conference Series*. 2021;1902(1):012110. DOI: 10.1088/1742-6596/1902/1/012110.

DOI: 10.51790/2712-9942-2021-2-2-7

ОБ УПРУГИХ СВОЙСТВАХ ПОРИСТЫХ СРЕД С ГАЗОВЫМИ ГИДРАТАМИ**А. А. Губайдуллин^{1,2,a}, О. Ю. Болдырева^{1,b}, Д. Н. Дудко^{1,b}**¹ Тюменский филиал Института теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича
СО РАН, г. Тюмень, Российская Федерация² Тюменский государственный университет, г. Тюмень, Российская Федерация^a ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-6231-6508>, A.A.Gubaidullin@yandex.ru^b timms@ikz.ru

Аннотация: проведен анализ современного состояния экспериментальных и теоретических исследований упругих свойств гидратосодержащих пористых сред. Сделан вывод о том, что во всех экспериментах установлена связь скоростей упругих волн с содержанием гидрата в поровом пространстве, а именно, наблюдается рост скоростей с увеличением гидратонасыщенности. В области теоретических исследований созданы математические модели упругих модулей гидратосодержащих пористых сред, позволяющие качественно и количественно описать результаты лабораторных опытов.

Ключевые слова: пористая среда, гидрат, упругие волны, скорость.

Благодарности: исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и Тюменской области в рамках научного проекта № 20-41-720003.

Для цитирования: Губайдуллин А. А., Болдырева О. Ю., Дудко Д. Н. Об упругих свойствах пористых сред с газовыми гидратами. *Успехи кибернетики*. 2021;2(2):82–89. DOI: 10.51790/2712-9942-2021-2-2-7.

ELASTIC PROPERTIES OF POROUS MEDIA CONTAINING GAS HYDRATES**Amir A. Gubaidullin^{1,2,a}, Olga Yu. Boldyreva^{1,b}, Dina N. Dudko^{1,b}**¹ Khristianovich Institute of Theoretical and Applied Mechanics, Tyumen Branch, Siberian Branch,
Russian Academy of Sciences, Tyumen, Russian Federation² University of Tyumen, Tyumen, Russian Federation^a ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-6231-6508>, A.A.Gubaidullin@yandex.ru^b timms@ikz.ru

Abstract: the state-of-the-art experimental and theoretical studies of the elastic properties of porous media containing gas hydrate was analyzed. It is concluded that all the experiments identified a relationship between the elastic wave velocities and the hydrate content in the porous space: the velocities increase with higher hydrate saturation. The theoretical research produced simulation models for estimating the modulus of elasticity of hydrate-containing porous media to qualitatively and quantitatively describe the results of laboratory experiments.

Keywords: porous medium, hydrate, elastic waves, velocity.

Acknowledgements: the research was supported by the RFBR and the Tyumen Region, project No. 20-41-720003.

Cite this article: Gubaidullin A. A., Boldyreva O. Yu., Dudko D. N. Elastic Properties of Porous Media Containing Gas Hydrates. *Russian Journal of Cybernetics*. 2021;2(2):82–89. DOI: 10.51790/2712-9942-2021-2-2-7.

Введение

Природный газ из залежей газовых гидратов в будущем может стать основным источником энергии, так как его разведанные запасы многократно превышают запасы газовых месторождений. Газогидрат представляет собой твердое вещество, похожее на спрессованный снег или лед. Он имеет клатратную структуру и является соединением воды и газа. Механические свойства гидрата (плотность, скорость звука, модули упругости) близки к свойствам льда. Природные газогидраты на 98 % состоят из метангидратов. Одними из основных методов поиска месторождений газовых гидратов являются сейсморазведка и акустический каротаж. Это, в свою очередь, обуславливает актуальность

исследований упругих характеристик газогидратных пластов, скоростей распространения продольных и поперечных волн в горных породах и осадках, содержащих газогидрат. В природе газовый гидрат встречается в вечномерзлых породах, но чаще — в глубоководных донных осадках, когда температура и давление соответствуют условиям образования гидрата. В России известны залежи гидратов в осадках территориальных вод морей и озера Байкал. В 60-е годы прошлого столетия были обнаружены месторождения гидратов в зоне вечной мерзлоты на севере СССР. Производилась опытная добыча газа на Мессояхском месторождении. Гидраты могут иметь различную морфологию: форму массивных слоев, прожилок или отдельных вкраплений. Гидратный пласт может подстилаться проницаемым пластом с подвижным газом или водой или быть изолированным. В порах гидратного пласта могут находиться гидрат и газ или вода (лед). Накопленные к настоящему времени данные наблюдений и лабораторных исследований по образованию/разложению гидратов, использование компьютерной томографии, магнитного резонанса позволяет описать и классифицировать структуру порового пространства гидратосодержащих отложений в зависимости от условий образования гидрата. Если гидрат образовался при небольшом начальном содержании воды и избытке свободного газа, то он располагается вокруг контактов зерен осадка или обволакивает эти зерна, тем самым увеличивая жесткость скелета осадка (цементация). Другой крайний случай — образование гидрата из газа, растворенного в заполняющей поры воде. В этом случае частицы гидрата могут плавать в поровой жидкости либо при достаточном количестве газа касаться стенок пор и брать на себя часть нагрузки на скелет, изменяя тем самым упругие характеристики пласта. В случае, когда начальная насыщенность пор водой имеет промежуточные значения, возможна комбинация описанных вариантов. Таким образом, упругие характеристики гидратного пласта зависят от насыщенности пор гидратом, и установление таких зависимостей является актуальной и значимой задачей. Решение такой задачи необходимо для решения обратных задач по разведке и оценке запасов месторождений природных газовых гидратов.

Для развития волновой динамики пористой среды с газовым гидратом необходимо построение математических моделей трехфазных сред, учитывающих несовпадение напряжений, скоростей, в общем случае — температур фаз. Такие модели необходимы для адекватного описания скоростей и затухания продольных и поперечных волн, их отражения и прохождения через границы между различными слоями пористой среды, отражения от преград и т.п. Уравнение состояния пористой среды содержит в качестве параметров упругие модули. Вообще говоря, они неизвестны. При наличии конкретного образца горной породы их можно определить в лабораторном опыте, например, путем измерения скоростей продольной и поперечной волн. Однако более предпочтительным является построение математических моделей упругих модулей как функций, зависящих в том числе от упругих модулей фаз пористой среды: минералов, из которых состоит скелет, поровых жидкости и газа, газового гидрата, для которых имеются табличные значения.

Модели упругих модулей

Рассмотрим модели, построенные ранее разными авторами, определяющие упругие модули пористой гидратосодержащей среды в описанных выше случаях образования гидрата: частицы гидрата несут нагрузку на скелет вместе с зёрнами скелета (load-bearing model), гидрат образован на контактах зерен (contact-cementing model) или обволакивает зёрна скелета (envelope-cementing model). Во всех этих случаях скелет среды можно рассматривать составленным из зерен породы и гидрата, то есть двухфазным. Ранее для определения модулей упругости сред с двухфазным скелетом были предложены две гипотезы: об однородности деформаций [1] и однородности напряжений [2] фаз. Эти предположения позволяют получить следующие формулы для эффективных модулей упругости (далее K — объемный упругий модуль всестороннего сжатия, G — модуль сдвига, α_1 , α_2 — объемные доли фаз в скелете) через модули упругости фаз:

$$K_V = \alpha_1 K_1 + \alpha_2 K_2,$$

$$G_V = \alpha_1 G_1 + \alpha_2 G_2$$

при однородных деформациях,

$$\frac{1}{K_R} = \frac{\alpha_1}{K_1} + \frac{\alpha_2}{K_2},$$

$$\frac{1}{G_R} = \frac{\alpha_1}{G_1} + \frac{\alpha_2}{G_2}$$

при однородных напряжениях.

Позднее в работе [3] показано, что для изотропных поликристаллических сред объемный и сдвиговый модули упругости принимают промежуточные значения между K_V , K_R и G_V , G_R .

В работе [4] предложено вычислять объемный и сдвиговый модули упругости исходя из минерального состава скелета из m составляющих как среднее арифметическое значений, вычисленных согласно гипотезам Voigt W. [1] и Reuss A. [2]:

$$K = \frac{1}{2} \left[\sum_{i=1}^m \alpha_i K_i + \left(\sum_{i=1}^m \frac{\alpha_i}{K_i} \right)^{-1} \right],$$

$$G = \frac{1}{2} \left[\sum_{i=1}^m \alpha_i G_i + \left(\sum_{i=1}^m \frac{\alpha_i}{G_i} \right)^{-1} \right].$$

Эти идеи были использованы в работах по построению моделей упругих модулей пористой гидратосодержащей среды.

1. Частицы гидрата несут нагрузку на скелет вместе с зёрнами породы (load-bearing model).

В работе [5] предложены следующие формулы для вычисления упругих модулей гидратосодержащих насыщенных газом осадочных пород:

$$K_{LB} = \left[\frac{\phi/\phi_0}{K_{HM} + \frac{4}{3}G_{HM}} + \frac{1-\phi/\phi_0}{K + \frac{4}{3}G_{HM}} \right]^{-1} - \frac{4}{3}G_{HM},$$

$$G_{LB} = \left[\frac{\phi/\phi_0}{G_{HM} + D} + \frac{1-\phi/\phi_0}{G + D} \right]^{-1} - D,$$

$$D = \frac{G_{HM}}{6} \left(\frac{9K_{HM} + 8G_{HM}}{K_{HM} + 2G_{HM}} \right).$$

Здесь K , G — модули упругости породы, ϕ_0 — начальная (до гидратообразования) пористость, $\phi = \phi_0(1 - s_h)$, где s_h — гидратонасыщенность. K_{HM} , G_{HM} — модули упругости упаковки сферических частиц, которые вычисляются согласно контактной теории Hertz-Mindlin [6]:

$$K_{HM} = \left[\frac{n^2(1-\phi_0)^2 G^2}{18\pi^2(1-\nu)^2} P \right]^{1/3},$$

$$G_{HM} = \frac{5-4\nu}{5(2-\nu)} \left[\frac{3n^2(1-\phi_0)^2 G^2}{2\pi^2(1-\nu)^2} P \right]^{1/3}.$$

Здесь P — эффективное давление, ν — коэффициент Пуассона породы, n — среднее число контактов частицы с соседними частицами.

2. Гидрат образован на контактах зёрен (contact-cementing model) или обволакивает зёрна скелета (envelope-cementing model).

Для насыщенной газом среды из одинаковых шариков, цементированных гидратом, предложено рассчитывать эффективные упругие модули следующим образом [5]:

$$K_C(\alpha) = \frac{n(1-\phi)}{6} \left(K_h + \frac{4}{3}G_h \right) S_n(\alpha),$$

$$G_C(\alpha) = \frac{K_C(\alpha)}{5} + \frac{3n(1-\phi)}{20} G_h S_\tau(\alpha),$$

$$S_n(\alpha) = A_n \alpha^2 + B_n \alpha + C_n,$$

$$\begin{aligned}
A_n &= -0.024153 \cdot D_n^{-1.3646}, \quad B_n = 0.20405 \cdot D_n^{-0.89008}, \\
C_n &= 0.00024649 \cdot D_n^{-1.9864}, \quad D_n = \frac{2G_H (1 - \nu) (1 - \nu_H)}{\pi G (1 - 2\nu)}, \\
S_\tau(\alpha) &= A_\tau \alpha^2 + B_\tau \alpha + C_\tau, \\
A_\tau &= -10^{-2} \left(2.26\nu^2 + 2.07\nu + 2.3 \right) \cdot D_\tau^{0.079\nu^2 + 0.1754\nu - 1.342}, \\
B_\tau &= \left(0.0573\nu^2 + 0.0937\nu + 0.202 \right) \cdot D_\tau^{0.0274\nu^2 + 0.0529\nu - 0.8765}, \\
C_\tau &= 10^{-4} \left(9.654\nu^2 + 4.945\nu + 3.1 \right) \cdot D_\tau^{0.01867\nu^2 + 0.4011\nu - 1.8186}, \\
D_\tau &= \frac{G_H}{\pi G}.
\end{aligned}$$

Здесь K_C , G_C — объемный и сдвиговый эффективные модули упругости цементированной гидратом пористой среды, G_h , ν_h — упругий модуль сдвига и коэффициент Пуассона для гидрата, n — среднее число контактов одного зерна с соседними, ϕ — пористость, s_h — гидратонасыщенность. Функции $S_n(\alpha)$, $S_\tau(\alpha)$ зависят от G , ν , G_h , ν_h . Параметр α зависит от гидратонасыщенности s_h и характеризует отношение радиуса цементирующего гидрата к радиусу зерна. При контактном цементировании (the contact-cementing model) $\alpha = \alpha_{CC}$, при обволакивающем цементировании (the envelope-cementing model) $\alpha = \alpha_{EC}$:

$$\begin{aligned}
\alpha_{CC} &= 2 \left(\frac{\phi s_h}{3n(1-\phi)} \right)^{0.25}, \\
\alpha_{EC} &= \left(\frac{2\phi s_h}{3(1-\phi)} \right)^{0.5}.
\end{aligned}$$

Для расчета эффективных упругих модулей по данной модели необходимы значения упругих модулей породы скелета и гидрата, среднее число контактов n (для упаковки сферических шариков обычно используется $n \approx 9$ [7]) и выражения для $S_n(\alpha)$, $S_\tau(\alpha)$. Формулы для $S_n(\alpha)$, $S_\tau(\alpha)$ [5] являются статистическими приближениями (погрешность не превышает 1 %) строгих решений теории цементации [7].

3. Пористая среда, насыщенная жидкостью и гидратом.

Модули упругости скелета K_{sat} , G_{sat} насыщенной жидкостью пористой среды вычисляются согласно теории Гассмана:

$$K_{sat} = K \frac{\phi K_{dry} - \frac{(1+\phi)K_f K_{dry}}{K} + K_f}{(1-\phi)K_f + \phi K - \frac{K_f K_{dry}}{K}}, \quad G_{sat} = G_{dry},$$

где K_{dry} , G_{dry} — модули упругости скелета сухой пористой среды, K_f — объемный модуль упругости жидкости. Как показали опыты, при образовании гидрата из растворенного газа или из смеси воды и ТГФ реализуется схема «load-bearing». В этом случае для расчета модулей упругости пористой среды, насыщенной водой и гидратом, в приведенных выше формулах вместо K_{dry} , G_{dry} используется K_{LB} , G_{LB} , а вместо K_f

$$\bar{K}_f = \left[\frac{s_h}{K_h} + \frac{1-s_h}{K_f} \right]^{-1}.$$

Экспериментальные исследования акустических свойств гидратосодержащих сред

Для понимания и правильной интерпретации результатов сейсморазведки и акустического каротажа, построения и проверки математических моделей упругих модулей гидратосодержащих пористых сред необходимо проведение лабораторных исследований. Уместно отметить, что ряд моделей являются полуэмпирическими, не отражают физики процессов, не говоря уже о формулах, аппроксимирующих экспериментальные точки.

В экспериментальных работах основным способом определения упругих модулей является измерение скоростей продольных и поперечных ультразвуковых волн (C_P , C_S) и гидратонасыщенности (s_h) в образцах пористых сред в процессе образования и разложения газового гидрата. В пористой среде продольная волна имеет две моды – быструю (деформационную) и медленную (фильтрационную). Пористая среда обладает дисперсионными и диссипативными свойствами, поэтому скорости волн зависят от частоты возмущения, а их амплитуды уменьшаются по мере распространения. Медленная волна имеет меньшую скорость и интенсивнее затухает по сравнению с быстрой волной. В экспериментах обычно используют ультразвуковые возмущения и под продольной волной имеют в виду ее быструю моду. При обработке результатов используют формулы для скоростей волн в твердом теле:

$$C_P = \sqrt{\frac{K + 4/3G}{\rho}}, \quad C_S = \sqrt{G/\rho},$$

где K , G – объемный и сдвиговый модули упругости, ρ – плотность.

Если образец среды можно моделировать стержнем, то используется формула для скорости продольной волны в стержне:

$$C = \sqrt{E/\rho}, \quad E = \frac{9GK}{3K + G}.$$

Эксперименты проводятся, в основном, с высокопроницаемыми синтетическими образцами (шарики из кварца), либо насыпными крупнозернистыми средами (песок). В качестве гидратообразующего вещества обычно используется газ метан (CH_4), либо жидкость тетрагидрофуран (ТГФ, $\text{C}_4\text{H}_8\text{O}$). В исходном состоянии, до образования гидрата, газ может быть свободным или растворенным в воде. Для лабораторного моделирования пласта, содержащего гидрат и газ, эксперимент обычно проводится с нагнетанием метана по методике «с избытком газа». В зависимости от начального содержания воды в порах может образоваться различное количество гидрата и, соответственно, могут реализоваться схемы “contact – cementing”, “envelope – cementing”, “load – bearing” и их комбинации. Для случая пласта с гидратом и водой в опытах используется смесь ТГФ с водой, которая является однофазной двухкомпонентной жидкостью, или вода с растворенным метаном.

В работе [9] проведены эксперименты с образцами песка, содержащими различное количество гидрата метана. Результаты показали резкое возрастание скоростей C_P , C_S при изменении содержания гидрата от 0 до $\approx 3\text{--}5\%$ и при дальнейшем увеличении гидратосодержания – постепенное увеличение C_P и C_S . Это говорит о том, что гидрат метана вначале цементирует песок, затем заполняет поровое пространство. Результаты продемонстрировали влияние цементации песка гидратом на скорости упругих волн. Эксперименты с образцами, содержащими гидрат ТГФ [10], показали, что с увеличением содержания гидрата в поровом пространстве скорость продольной волны монотонно возрастает и стремится к предельному значению. В работе [11] представлены результаты исследования по сбору и анализу результатов измерений скоростей волн в восьми лабораториях из нескольких стран. Были измерены скорости P - и S - волн (C_P и C_S) в сухом, частично и полностью насыщенном водой, замороженном и содержащем гидрат метана Оттавском песке F110. Наблюдался значительный разброс значений скоростей, который, в основном, объяснялся различиями в уплотнении и пористости образцов, неоднородным распределением поровых жидкостей, льда и гидрата, а также отличиями в методах подготовки образцов и измерений в разных лабораториях. В экспериментах [12] измерялись гидратонасыщенность (s_h) и скорости ультразвуковых P - и S - волн (C_P и C_S) в процессе образования газового гидрата в образцах. Анализ результатов показал, что гидрат вначале образовался на контактах зерен, затем рос в поровом пространстве и достиг стенок пор.

Первая в России оригинальная установка и опыты по созданию гидратосодержащих образцов и изучению их акустических свойств были описаны в статье [13]. Позже проведена большая (более ста) серия работ [14] и получены результаты экспериментов по измерению акустических свойств образцов с широким спектром веществ и параметров. В исследованиях [15–16] представлены результаты опытов с песчаными образцами, содержащими разные объемы воды, льда, гидратов метана и ТГФ. Полученные зависимости акустических скоростей интерпретируются как соответствующие разным типам заполнения пор льдом или гидратом: модель «цементации» контактов между зёрнами песка при образовании льда гидрата, модель «цементации» с обволакиванием зёрна при образовании гидрата метана, модель

«заполнения» пор при образовании гидрата ТГФ. Отмечается, что при малых (менее 0.2) насыщенностях льдом или гидратом скорости продольных и поперечных волн быстро растут и очень близки. Далее, с увеличением насыщенности в случае льда скорости продолжают расти, а в случае гидрата рост сильно замедляется. Однако с достижением гидратонасыщенностью значений 0.6–0.7 скорости вновь быстро возрастают. Последнее можно объяснить тем, что частицы в порах касаются стенок и несут нагрузку вместе со скелетом. В опытах также измерялось затухание (поглощение) волн. Отмечено, что с образованием льда или гидрата при малых насыщенностях поглощение резко уменьшается, что также свидетельствует о консолидации скелета за счет цементации. В работе [17] проведены опыты с образованием гидрата из растворенного в воде метана. Отмечается, что так же, как в случае ТГФ, скорости волн с увеличением гидратонасыщенности растут плавно. Опыты с гидрофобным песком показали, что в этом случае гидрат образуется по схеме «заполнения пор» и не цементирует скелет. В другом опыте [18] обнаружены два эффекта: падение скоростей при длительной выдержке образца с гидратом и с увеличением температуры, причем темп падения увеличивается с приближением температуры к равновесной. Кроме описанных, проводились опыты с угольными образцами, гидратом ксенона [19], в последнем случае одновременно выполнялась рентгеновская томография. В работе [20] с помощью синхротронного рентгеновского излучения выполнена уникальная трехмерная визуализация процессов образования и разложения гидрата в масштабе пор песчаного образца. В частности, отмечено, что поведение гидрата при разложении может зависеть от истории его образования.

Заметим, что наблюдаемые в экспериментах значения скоростей имеют существенный разброс. Например, в экспериментах [12] с гидратом метана при изменении s_h от 0 до $\approx 0.6 \div 0.7$ скорости изменялись в пределах

$$712 \text{ (м/с)} \leq C_S \leq 1189 \text{ (м/с)}, 1722 \text{ (м/с)} \leq C_P \leq 2583 \text{ (м/с)}.$$

В экспериментах [14] при изменении s_h от 0 до 0.7 скорости изменялись в пределах

$$950 \text{ (м/с)} \leq C_S \leq 2550 \text{ (м/с)}, 1400 \text{ (м/с)} \leq C_P \leq 4000 \text{ (м/с)}.$$

Сопоставление результатов экспериментов с данными других авторов и верификация математических моделей упругих модулей выполнены в [21]. В работе использованы результаты [11, 9, 22–24] для метангидрата и [25–27] — для ТГФ. Несмотря на количественные отличия, вызванные различием в установках и методиках, все результаты демонстрируют отчетливую зависимость скоростей волн от гидратонасыщенности. При верификации математических моделей отмечено, что результаты опытов в случае образования гидрата по методу «с избытком газа» хорошо описываются моделью «envelope – cementing», а в случае ТГФ лучше подходит модель «load – bearing».

Заключение

Выполнен анализ современного состояния экспериментальных и теоретических исследований упругих свойств гидратосодержащих пористых сред. В экспериментальных работах основным способом определения упругих модулей является измерение скоростей продольных и поперечных ультразвуковых волн и гидратонасыщенности в неконсолидированных образцах в процессе образования и разложения газового гидрата. Эксперименты проводятся с высокопроницаемыми синтетическими образцами либо насыщенными крупнозернистыми средами. В качестве гидратообразующего вещества обычно используется газ метан или жидкость тетрагидрофуран (ТГФ). Во всех экспериментах установлена связь скоростей упругих волн с содержанием гидрата в поровом пространстве, а именно, наблюдается рост скоростей с увеличением гидратонасыщенности. При этом в зависимости от условий образования гидрата выделяются два характерных вида зависимостей. Если поры заполнены газом и гидратом, то скорости резко возрастают при малых гидратонасыщенностях (< 0.2), далее темп роста падает и снова увеличивается при больших гидратонасыщенностях (> 0.6). В этом случае в зависимости от начального содержания воды гидрат образуется на контактах зерен скелета или обволакивает их и цементирует скелет, далее растет в порах и начинает касаться стенок пор и увеличивает жесткость скелета. Если поры заполнены гидратом и водой, насыщенной газом, или тетрагидрофураном, то гидрат растет в порах и начинает влиять на жесткость скелета после достаточного заполнения порового пространства. Наблюдаемые в экспериментах различных авторов значения скоростей имеют разброс, что объясняется различием свойств образцов, установок и методик проведения экспериментов.

Созданы математические модели упругих модулей гидратосодержащих пористых сред, позволяющие качественно и количественно описать результаты лабораторных опытов. При построении мо-

делей учитываются параметры основной породы и насыщающих среду флюида и гидрата (плотности, упругие модули, пористость, насыщенности фаз). Модели могут содержать параметры, значения которых следует подбирать из условия совпадения измеренных в эксперименте и рассчитанных скоростей упругих волн.

ЛИТЕРАТУРА

1. Voigt W. *Lehrbuch der Kristallphysik*. Leipzig: Teubner; 1928. 962 p.
2. Reuss A. Berechnung der Fließgrenze von Mischkristallen auf Grund der Plastizitätsbedingung (Determination of the Yield Point of Polycrystals Based on the Yield Condition of Single Crystals). *Z. Angew. Math. Und Mech.* 1929;9(1):49–58.
3. Hill R. The Elastic Behaviour of a Crystalline Aggregate. *Proc. Phys. Soc. A.* 1952;65:349–354.
4. Helgerud M. B., Dvorkin J., Nur A. Elastic-Wave Velocity in Marine Sediments with Gas Hydrates: Effective Medium Modeling. *Geophys. Res. Letters*. 1999;26(13):2021–2024.
5. Dvorkin J., Nur A. Elasticity of High-Porosity Sandstones: Theory for Two North Sea Data Sets. *Geophysics*. 1996;61:1363–1370.
6. Mindlin R. D. Compliance of Elastic Bodies in Contact. *Journal of Applied Mechanics*. 1949;16:259–268.
7. Mavko G., Mukerji T., Dvorkin J. *The Rock Physics Handbook: Tools for Seismic Analysis in Porous Media*. Cambridge University Press, Cambridge; 1998.
8. Dvorkin J., Nur A., Yin H. Effective Properties of Cemented Granular Materials. *Mech. Mater.* 1994;18:351–366.
9. Priest J. A., Best A. I., Clayton C. R. I. A Laboratory Investigation into Seismic Velocities of Methane Gas Hydrate-Bearing Sand. *Journal of Geophysical Research*. 2005;110:B04102.
10. Li Feng-Guang, Sun Chang-Yu, Zhang Qin, Liu Xiao-Xiang, Guo Xu-Qiang, Chen Guang-Jin. Laboratory Measurements of the Effects of Methane/Tetrahydrofuran Concentration and Grain Size on the P-Wave Velocity of Hydrate-Bearing Sand. *Energy Fuels*. 2011;25:2076–2082. dx.doi.org/10.1021/ef101665v.
11. Waite W. F., Santamarina J. C., Rydzy M., Chong S. H., Grozic J. L. H., Hester K., Howard J., Kneafsey T. J., Lee J. Y., Nakagawa S., Priest J., Rees E., Sloan E. D. Overview of the Inter-Laboratory Comparison of Wave Velocity Measurements in Sand with Gas Hydrates and Other Pore-Filling Materials. *Fire in the Ice*. 2012;12(1):16–21.
12. Bu Q. T., Hu G. W., Ye Y. G., Liu C. L., Li C. F., Best A. I., Wang J. C. The Elastic Wave Velocity Response of Methane Gas Hydrate Formation in Vertical Gas Migration Systems. *J. Geophys. Eng.* 2017;14:555–569.
13. Дучков А. Д., Дучков А. А., Манаков А. Ю., Пермяков М. Е., Голиков Н. А., Дробчик А. Н. Лабораторное моделирование и измерение акустических свойств образцов пород, содержащих гидраты метана. *Доклады Академии наук*. 2017;472(1):80–84. DOI: 10.7868/S0869565217010169.
14. Дучков А. Д., Дучков А. А., Дугаров Г. А., Дробчик А. Н. Скорости ультразвуковых волн в песчаных образцах, содержащих воду, лед или гидраты метана и тетрагидрофурана (лабораторные измерения). *Доклады Академии наук*. 2018;478(1):94–99.
15. Дугаров Г. А., Дучков А. А., Дучков А. Д., Дробчик А. Н. Лабораторное изучение акустических свойств гидратосодержащих осадков. *Ученые записки физического факультета Московского университета*. 2017;5:1750812.
16. Дучков А. Д., Дугаров Г. А., Дучков А. А., Дробчик А. Н. Лабораторные исследования скорости и поглощения ультразвуковых волн в песчаных образцах, содержащих воду/лед, гидраты метана и тетрагидрофурана. *Геология и геофизика*. 2019;60(2):230–242. DOI: 10.15372/GiG2019015.
17. Нефедкина Т. В., Лыхин П. А., Дугаров Г. А. Определение упругих параметров азимутально-анизотропных сред из многоволновых AVOA-данных методом нелинейной оптимизации. *Геофизические технологии*. 2018;2:14–26. DOI: 10.18303/2619–1563–2018–2–2.
18. Фокин М. И., Дугаров Г. А., Дучков А. А. Экспериментальные акустические измерения на песчаных неконсолидированных образцах, содержащих гидрат метана. *Ученые записки физического факультета Московского университета*. 2019;4:1940501.
19. Дробчик А. Н., Дугаров Г. А., Дучков А. А., Купер К. Э. Акустические измерения и рентгеновская томография песчаных образцов, содержащих гидрат ксенона. *Геофизические технологии*. 2019;4:17–23. DOI: 10.18303/2619–1563–2019–4–17.

20. Nikitin V. V., Dugarov G. A., Duchkov A. A., Fokin M. I., Drobchik A. N., Shevchenko P. D., De Carolod F., Mokso R. Dynamic In-Situ Imaging of Methane Hydrate Formation and Selfpreservation in Porous Media. *Marine and Petroleum Geology*. May 2020;115:104234. <https://doi.org/10.1016/j.marpetgeo.2020.104234>.
21. Dugarov G. A., Duchkov A. A., Duchkov A. D., Drobchik A. N. Laboratory Validation of Effective Acoustic Velocity Models for Samples Bearing Hydrates of Different Type. *Journal of Natural Gas Science and Engineering*. 2019;63:38-46. <https://doi.org/10.1016/j.jngse.2019.01.007>.
22. Ebinuma T., Suzuki K., Nagao J., Oyama H., Narita H. Ultrasonic Wave Velocities Associated with Formation and Dissociation of Methane Hydrate in Artificial Sandy Sediment. *Offshore Technology Conference*. 2008; OTC 19260.
23. Ren Shao Ran, Liu Yongjun, Liu Yixing, Zhang Weidong. Acoustic Velocity and Electrical Resistance of Hydrate Bearing Sediments. *Journal of Petroleum Science and Engineering*. 2010;70(1–2):52–56. DOI: 10.1016/j.petrol.2009.09.001.
24. Rydzy M. B. *The Effect of Hydrate Formation on the Elastic Properties of Unconsolidated Sediment*. 2014. PhD thesis. Colorado School of Mines, Colorado, USA.
25. Yun T. S., Francisca F. M., Santamarina J. C., Ruppel C. Compressional and Shear Wave Velocity in Uncemented Sediment Containing Gas Hydrate. *Geophysical Research Letters*. 2005;32:L10609.
26. Lee J. Y., Francisca F. M., Santamarina J. C., Ruppel C. Parametric Study of the Physical Properties of Hydrate-Bearing Sand, Silt, and Clay Sediments: 2. Small-Strain Mechanical Properties. *Journal of Geophysical Research*. 2010;115:B11105. DOI: 10.1029/2009JB006670.
27. Lee J. Y., Santamarina J. C., Ruppel C. Volume Change Associated with the Formation and Dissociation of Hydrate in Sediment. *Geochemistry, Geophysics, Geosystems*. 2010;11(3):13.

DOI: 10.51790/2712-9942-2021-2-2-8

ОПЫТ СОВМЕСТНОЙ РАЗРАБОТКИ СЛОЖНЫХ ПРОГРАММНО-АППАРАТНЫХ СИСТЕМ ОБРАБОТКИ БОЛЬШИХ ПОТОКОВ ДАННЫХ

М. М. Лаврентьев^{1,a}, М. Ю. Шадрин^{1,2}, И. Г. Таранцев^{1,2}

¹ Институт автоматики и электрометрии СО РАН, Новосибирск, Российская Федерация

² ООО «СофтЛаб-НСК», Новосибирск, Российская Федерация

^a lavrentiev@iae.nsk.su

Аннотация: в работе рассматриваются вопросы построения простых и надежных решений для обработки непрерывных потоков данных на обычных операционных системах, которые не являются системами реального времени. Результаты получены в ходе плодотворного сотрудничества между Институтом автоматики и электрометрии СО РАН и ООО «СофтЛаб-НСК». Предлагаются необходимые и достаточные программно-аппаратные решения, объясняются принципиальные требования к функциональности программных и аппаратных компонент предлагаемых решений. Также в статье предлагается метод разделения программных компонент, обеспечивающий высокую надежность результирующей системы.

Ключевые слова: потоки данных, непрерывная обработка.

Для цитирования: Лаврентьев М. М., Шадрин М. Ю., Таранцев И. Г. Опыт совместной разработки сложных программно-аппаратных систем обработки больших потоков данных. *Успехи кибернетики*. 2021;2(2):90–95. DOI: 10.51790/2712-9942-2021-2-2-8.

COLLABORATIVE DEVELOPMENT OF COMPLEX SOFTWARE AND HARDWARE SYSTEMS FOR HIGH DATA RATE PROCESSING

Mikhail M. Lavrentiev^{1,a}, Mikhail Y. Shadrin^{1,2}, Igor G. Tarancev^{1,2}

¹ Institute of Automation and Electrometry, Siberian Branch, Russian Academy of Sciences, Novosibirsk, Russian Federation

² SoftLab-NSK, OOO, Novosibirsk, Russian Federation

^a lavrentiev@iae.nsk.su

Abstract: this study covers the development of simple and robust solutions for processing continuous data flows on conventional (not real-time) operating systems. It is collaborative research by the Institute of Automation and Electrometry and SoftLab-NSK. The necessary and sufficient software and hardware solutions are proposed, the basic requirements for the functionality of the software and hardware components of the proposed solutions are explained. This paper also proposes a software components separation method that ensures the high reliability of the resulting system.

Keywords: high data rate, continuous data processing.

Cite this article: Lavrentiev M. M., Shadrin M. Y., Tarancev I. G. Collaborative Development of Complex Software and Hardware Systems for High Data Rate Processing. *Russian Journal of Cybernetics*. 2021;2(2):90–95. DOI: 10.51790/2712-9942-2021-2-2-8.

Начало сотрудничества

В далеком 1991 году сотрудниками лаборатории машинной графики ИАиЭ СО РАН была образована компания «СофтЛаб-НСК». Первым продуктом компании стало устройство «Видеояма», обеспечивающее запись синтезированной компьютерной графики на видеомagnetofоны. Оно было создано на базе разработанного в лаборатории тренажера для обучения головок наведения крылатых ракет в рамках конверсии военных разработок в гражданскую промышленность. В то время алгоритм JPEG только создавался, поэтому для устройства в рамках института был разработан оригинальный алгоритм сжатия синтезированных изображений [1, 2]. Компания же выпустила на рынок соответствующий продукт.

Опыт эксплуатации первых устройств показал необходимость резкого удешевления их стоимости. Тогда-то и родилась идея использования персонального компьютера как основы для создания

системы воспроизведения синтезированной графики. В 1993 году была совместно разработана и вышла в свет плата расширения в персональный компьютер IBM-PC, который можно было свободно купить и который уже имели компании, работающие в области 3D-графики. Программное обеспечение обеспечивало воспроизведение синтезированного фрагмента ролика длиной до нескольких секунд в виде стандартного телевизионного сигнала (ПАЛ, СЕКАМ, Y/C, YUV или RGB). В 1996 году вышла вторая плата — «Форвард», на которой использовался аппаратный кодек JPEG, что позволило на порядок понизить требования к передаваемым потокам данных и обеспечило непрерывный режим работы системы. Решения на платах «Форвард» могли воспроизводить ролики непрерывно неограниченное время в режиме 24/7/365 — 24 часа в сутки, 7 дней в неделю, 365 дней в году (раз в год нужно выключить и обслужить ПК, чтобы он надежно работал весь следующий год). «Форварды» разошлись не только по всей России, но по всему миру.



Рис. 1. Плата «Форвард» с комплектом программного обеспечения

Компания «СофтЛаб-НСК» и лаборатория института активно сотрудничают: лаборатория обеспечивает исследование и разработку новых технологий, а компания отвечает за их внедрение и создание коммерческих продуктов. Основной причиной успеха стало грамотное разделение работы между программной и аппаратной компонентами системы [3]. Решения «Форвард» базировались на операционной системе Windows. В те времена именно на Windows работали большинство компаний, занимающихся компьютерной графикой. Топовые системы компании «Silicon Graphics» были очень дороги для российских потребителей. «Apple» пришли в видеомонтаж слишком поздно. Системы на базе UNIX всегда были слишком сложными для творческих работников (художников, дизайнеров). На российском рынке компьютерной графики тогда царил 3DStudio Max под Windows. Операционная система Windows не является системой реального времени. Задержка выполнения любой программы может достигать многих сотен миллисекунд или даже секунд. Тем не менее для пользователя эти задержки являются приемлемыми, и пришлось разрабатывать решение именно под Windows. Телевизионный сигнал жестко таймирован — система обязана каждые 40 миллисекунд генерировать очередное изображение. Эта задача была возложена на плату ввода-вывода. Плата использует внутреннюю память для буферизации очередного изображения и занимается формированием телевизионного сигнала в соответствии с требованиями стандарта. По DMA (Direct Memory Access) плата самостоятельно копирует данные из памяти компьютера во внутренний буфер и, наоборот, из внутреннего буфера — в память компьютера (входные и выходные потоки видео). Работа обычных программ на компьютере не может помешать работе DMA, поэтому данные успевают скопироваться за время кадра. Также плата каждые 40 миллисекунд инициирует через аппаратные прерывания вызов программного обеспечения — драйвера платы. Хотя обработка прерывания может задерживаться на какое-то время, практически всегда это время не превышает десятка миллисекунд. Получив управление, драйвер передает в плату информацию о том, откуда нужно копировать следующий блок данных.

Плата обеспечивает буферизацию данных на уровне нескольких кадров: пока плата выводит на выход один кадр и копирует внутрь себя следующий кадр, драйвер успевает дать ей задание еще на кадр вперед. Однако из опыта эксплуатации известно, что операционная система может «зависнуть»

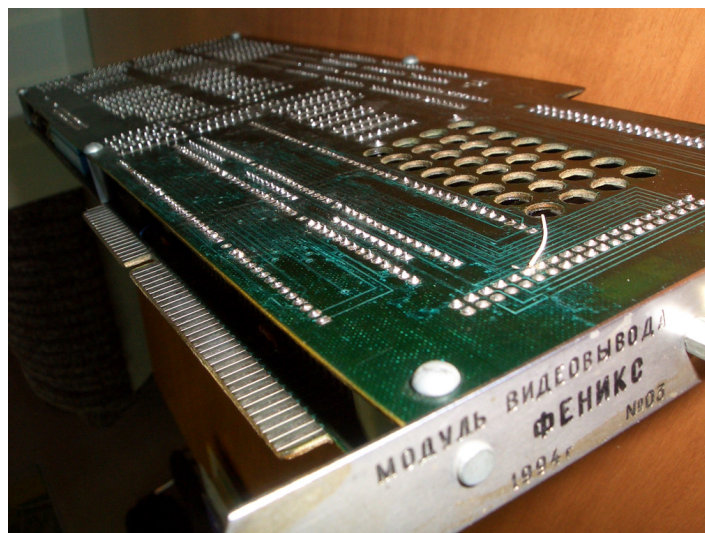


Рис. 2. «Феникс» — первая плата расширения в персональный компьютер для вывода видео

на десятки кадров, вплоть до секунды. Поэтому следующий уровень буферизации реализован на программном уровне. Драйвер платы выполняет роль микшера/коммутатора. По запросу программы он отводит в оперативной памяти компьютера большой буфер (на несколько десятков кадров) и организует на этом буфере очередь. Программа генерирует последовательность изображений и записывает их в очередь, следя за тем, чтобы очередь была постоянно заполнена. Драйвер в прерывании удаляет из очереди уже показанные изображения и прописывает в плату информацию о следующем изображении. Как правило, приложение создает пару очередей: одна очередь используется для воспроизведения текущего списка роликов, а вторая очередь заполнена первыми кадрами альтернативного списка роликов. В любой момент времени оператор может нажать кнопку старта альтернативного списка, тогда программа даст команду драйверу и он переключится с одного буфера на другой. Поскольку данные в буфере уже заполнены, переключение происходит максимально быстро — буквально в следующем кадре. Задержка переключения соответствует привычным для пользователя задержкам и не превышает времени реакции человека. Таким образом, аппаратная буферизация гарантирует стабильность выдачи данных на уровне десятков миллисекунд, а программная буферизация в оперативной памяти компьютера — гарантирует стабильность работы на несколько секунд вперед. Эта технология успешно работает и сейчас.

За 30 лет сотрудниками компании «СофтЛаб-НСК» и лаборатории № 13 ИАиЭ СО РАН было разработано много разных решений, ориентированных на обработку больших потоков данных в темпе поступления этих данных. Для большинства из них технология буферизации данных на очередях в оперативной памяти компьютера является ключевой. Вот некоторые из них:

- «TitleEngine» — технология генерации и совмещения многослойных полупрозрачных титров, позволяющая совмещать гарантированную плавность движения с интерактивностью управления (в любой момент можно включить или выключить любой слой титров) [4, 5, 6];
- «PostPlay» — технология буферизованной записи сжатых видео- и звуковых данных на жесткие диски персонального компьютера, позволяющая минимизировать нагрузку на диски и получить максимальную скорость чтения/записи данных на диск при многоканальной записи/чтении;
- «AutoDetect» — технология анализа потока видео/звука для детектирования в нем записанных ранее фрагментов видео/звука. При совпадении входного видео/звука с одним из фрагментов система генерирует управляющее событие, которое может, например, начинать с точностью до кадра воспроизведение списка роликов.

Отметим, что разработанное для удобного воспроизведения видеоповторов программно-аппаратное решение нашло свое применение в ФГБУ «Научно-исследовательский испытательный центр подготовки космонавтов имени Ю.А. Гагарина». Как институтом, так и компанией выполнено несколько проектов, поставленные системы визуального контроля эксплуатируются и получили высокую оценку.



Рис. 3. Решение для визуального контроля процесса тренировок космонавтов в НИИ ЦПК имени Ю. А. Гагарина

Проблема надежности

Другой проблемой создания сложных программно-аппаратных систем для обработки больших потоков данных является проблема надежности [7]. А именно, постепенно, с усложнением систем обработки, приходится использовать программное обеспечение (библиотеки) от сторонних производителей. Если программный код собственной разработки можно отладить и быть уверенным в его высокой надежности, то внешние библиотеки выступают в роли «черного ящика». К сожалению, такие технологии Windows, как DirectShow, славятся своей нестабильностью. Как создать надежную систему из ненадежных компонент?

Сотрудники лаборатории ИАиЭ СО РАН предложили решение в ответе на вопрос о максимально допустимом времени отказа системы, то есть о том, как долго системе можно не работать. Если время отказа не должно превышать 100 миллисекунд, то в решениях компании «СофтЛаб-НСК» рекомендуется использовать горячее резервирование и специальное устройство «watch dog». Горячее резервирование означает полное дублирование системы вторым компьютером с идентичным набором «железа» и софта. Выходы обеих систем поступают на коммутатор резерва, который управляется устройством «watch dog». Логика управления устройством «watch dog» следующая. Пользовательское приложение регулярно сообщает драйверу, что у него все будет хорошо еще некоторое время. Драйвер в каждом прерывании сравнивает это время с текущим и оценивает глубину заполненности очереди на воспроизведение. Если данные в очереди есть и приложение недавно рапортовало о хорошем статусе, то драйвер посылает команду на устройство «watch dog», что все хорошо. Если в течение пары кадров на устройство «watch dog» не приходила команда, то оно автоматически переходит в режим «авария» и переключает коммутатор резерва. Традиционно устройство «watch dog» подключают к основному компьютеру, поэтому переключение происходит при любом отказе: при отключении питания, при отказе платы ввода-вывода, при «зависании» компьютера, при «зависании» пользовательских программ. Для упрощения работы оператора и уменьшения числа человеческих ошибок пользовательские приложения компании «СофтЛаб-НСК» поддерживают режим «зеркалирования», когда действия оператора в одном приложении автоматически пересылаются в приложение на зеркалируемом компьютере. То есть оператору не нужно повторять действия на обоих компьютерах.

Если же время отказа может быть достаточно большим, в пределах десятков секунд или минут, то в решениях компании достаточно использовать разделение системы на отдельные программные модули, исполняющиеся в независимых процессах. При «взрыве» любого процесса специальная система

автоматически запускает новый процесс вместо выбывшего из работы. Такая модульность системы на уровне отдельных процессов, конечно же, порождает дополнительные трудности, связанные не только с управлением, но и с передачей больших потоков данных между процессами. Для этого опять же необходимо использовать буферизацию данных в оперативной памяти компьютера. При этом решения компании избегают лишних копирований данных: модуль «поставщик данных» заполняет изображение в памяти буфера, а модуль «приемник данных» берет данные для анализа прямо из памяти буфера.

Также разделение на процессы успешно решает проблему надежности работы системы в целом при непродолжительной перегрузке. Задавая разные приоритеты разным программным модулям, можно управлять временем работы каждого модуля. При полной загрузке процессора в первую очередь будут работать только важные модули с высочайшим приоритетом. К сожалению, в обычных операционных системах нет аналогичного управления приоритетом выполнения файловых операций. Поэтому в решениях компании используется собственный модуль приоритизации запросов к файловой системе. Это решает проблему при следовании рекомендованному рабочему процессу, но если пользователь запустит стороннее приложение, то система в целом может не успеть своевременно отработать все запросы на чтение/запись. Технология «PostPlay» как раз гарантирует своевременность записи и чтения данных.

Заключение

В настоящее время компания «СофтЛаб-НСК» выпускает широкий спектр плат ввода-вывода, включая платы для работы с телевизионным сигналом с разрешением UHD 4K (2840x2160 60 к/с). По-прежнему созданием алгоритмов обработки потоков данных занимаются сотрудники ИАиЭ СО РАН, а их встраиванием в рыночные продукты – компания. В современных платах все больший акцент делается на программном обеспечении: в них не используются аппаратные кодеры видео, поскольку вся обработка, включая кодирование и декодирование видео, выполняется стандартными средствами современного персонального компьютера. Решения компании мигрируют на операционную систему Linux, в первую очередь, это касается решений для современного цифрового телевидения. Увеличение потоков данных, передаваемых в современном телевидении, ставит перед сотрудниками лаборатории новые задачи, которые они успешно решают совместно с сотрудниками компании «СофтЛаб-НСК».

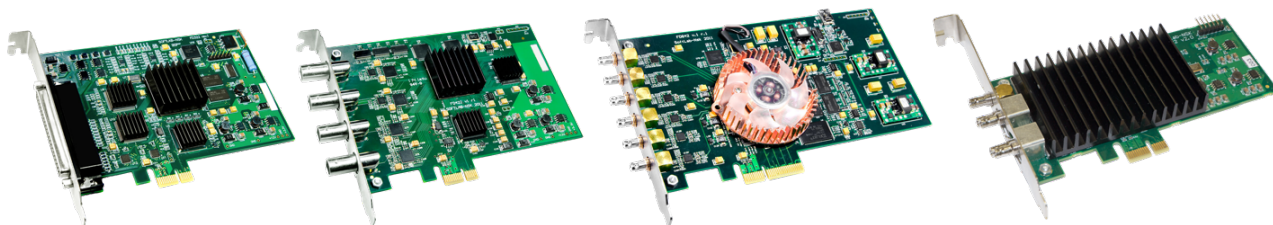


Рис. 4. Линейка современных плат компании «СофтЛаб-НСК»

ЛИТЕРАТУРА

1. Арсенин И. М., Морозов Б. Б., Роговой И. В., Таранцев И. Г., Тарасов Ю. В., Токарев А. С. Сжатие синтезированных изображений для систем реального времени. *Автометрия*. 1994;6:78–83.
2. Таранцев И. Г. Оптимизированный алгоритм сжатия синтезированных изображений для систем реального времени. *Автометрия*. 1997;2:70–74.
3. Арсенин И. М., Черепанов В. В. Методы управления с точностью до кадра параметрами воспроизведения мультимедиа-данных в ОС Windows. *Наукоемкое программное обеспечение*: семинар, 10–11 июля 2003 года, Новосибирск.
4. Арсенин И. М., Морозов Б. Б., Садов В. Г., Таранцев И. Г. Метод построения изображений в системах генерации титров. *Автометрия*. 1997;2:75–82.
5. Арсенин И. М., Таранцев И. Г. Ядро системы генерации многослойных динамических титров. *Графикон-2006*: труды 16-й Междунар. конф. по компьютерной графике и ее приложениям, 1–5 июля 2006 года, Новосибирск.

6. Гагарин А. А., Шишкин Д. Ю., Таранцев И. Г. Архитектура генераторов изображений для системы генерации многослойных динамических титров. *Графикон-2006*: труды 16-й Междунар. конф. по компьютерной графике и ее приложениям, 1–5 июля 2006 года, Новосибирск.
7. Арсенин И. М., Комаров А. С., Таранцев И. Г. Способы повышения надежности приложений при использовании технологии DirectShow. *Ершовская конференция по информатике — 2011, Научное программное обеспечение*: семинар, 27 июня – 1 июля 2011 года, Новосибирск.

Сетевое издание. Полные тексты статей размещаются на официальном сайте издания jsyb.ru.

Адрес учредителя и издателя:

Федеральное государственное учреждение «Федеральный научный центр
Научно-исследовательский институт системных исследований Российской академии наук»,
117218, г. Москва, Нахимовский просп., дом 36, корпус 1. Телефон: +7 (495) 718-21-10.

Дата выхода в свет 30.06.2021.

Формат 60 × 84/8.

Усл. печ. л. 4,4. Уч.-изд. л. 6,5.

Цена свободная.