Java, тоді як наступні дві системи дозволяють досліднику концентрувати увагу лише на гуманітарному аспекті задачі, яка моделюється.

Political Science-Identity (PS-I) не вимагає від дослідника жодних навичок програмування, володіє простим та зрозумілим графічним інтерфейсом, є безкоштовною та з відкритим кодом. Дослідник має можливість задати характеристики кожному окремому агенту, до того ж можливо прослідкувати як великомасштабні явища спричиняються локальною взаємодією окремих агентів. Ця інформаційна система спеціалізується на розв’язанні питань політичних наук, що, з одного боку, робить її незамінною саме в цій сфері, а з іншого, обмежує сферу її використання. Саме тому найкращою обрано NetLogo.

NetLogo – система, яка володіє простою та потужною мовою програмування, вбудованим графічним інтерфейсом та вичерпною пояснювальною інформацією. Вона особливо підходить для моделювання складних динамічних систем. Дослідник може задати характеристики (параметри) тисячам незалежних агентів, що робить можливим посилити зв'язок між поведінкою агентів на мікрорівні та наслідками цієї поведінки на макрорівні, так само як і за допомогою системи PS-I. Мова програмування NetLogo містить багато високорівневих структур та примітивів, що значно зменшує необхідність застосування низькорівневого програмування у процесі моделювання.

А. Досяк

Науковий керівник – д-р фіз.-мат. наук, проф. М.В. Кутнів

ЧИСЕЛЬНЕ РОЗВ’ЯЗУВАННЯ НЕЛІНІЙНИХ КРАЙОВИХ ЗАДАЧ НА ПІВОСІ, ЯКІ МОДЕЛЮЮТЬ ПЕРЕНЕСЕННЯ ПРОТОНІВ У СИСТЕМАХ З ВОДНЕВИМ ЗВ’ЯЗКОМ

Розглянемо крайову задачу для нелінійного рівняння Клейна-Гордона

$$\frac{\partial U}{\partial t} = \frac{\partial^2 U}{\partial \xi^2} - \Phi'(U), \qquad \xi \in (-\infty, \infty), \tag{1}$$

$$U(\xi,0)=U_0(\xi), \qquad \frac{\partial U(\xi,0)}{\partial t}=\overline{U}_0(\xi)\,, \tag{2}$$

$$\lim_{\xi\to-\infty} U(\xi,t)=U_1, \qquad \lim_{\xi\to\infty} U(\xi,t)=U_2\,, \tag{3}$$

де U_1, U_2 – локальні мінімуми функції $\Phi(U)$, причому $\Phi(U_1)=\Phi(U_2)=0$. Математичні моделі багатьох фізичних процесів, зокрема процесу перенесення протонів у системах із водневим зв'язком, зводяться до задачі (1)–(3). Для випадку однокомпонентної математичної моделі перенесення протонів у системах із водневим зв'язком потенціальна функція $\Phi(U)$ може мати вигляд

$$\Phi(U)=2\left\{\frac{\cos(U/2)-l}{1-n\left[\cos(U/2)-l\right]}\right\}^2$$

$$0\le l<1, \quad -(1+l)^{-1}<n<(1-l)^{-1}.$$

Розв'язок задачі (1) – (3) будемо шукати у вигляді біжучої хвилі

$$U(\xi,t)=u(x)\,,$$

де $x=\xi-vt$. Тоді отримаємо звичайне диференціальне рівняння $(1-v^2)\,u''=\Phi'(u), \qquad x\in(-\infty,\infty)$ з граничними умовами

$$\lim_{x\to-\infty} u(x)=U_1, \qquad \lim_{x\to\infty} u(x)=U_2\,.$$

Зазначимо, що функція $u(x)$, яка є розв'язком цієї задачі, — непарна, а тому задачу можна розглядати на півосі

$$u''=-4\frac{(\cos(u/2)-l)\sin(u/2)}{(1-n(\cos(u/2)-l))^3}, \qquad x\in(0,\infty)$$

$$u(0)=0, \qquad \lim_{x\to\infty} u(x)=2\arccos(l)\,.$$

Після заміни змінних $\tilde{u}(x)=u(x)-2\arccos(\lambda)$ та перепозначення $\tilde{u}=u$ отримаємо задачу

$$\frac{d^2u}{dx^2}-2(1-l^2)u=$$

$$= -4\frac{(\cos(u/2+\arccos(l)) - l)\sin(u/2+\arccos(l))}{(1-n(\cos(u/2+\arccos(l)) - l))^3} - \tag{4}$$

$$-2(1-l^2)u, \quad x \in (0,\infty)$$

$$u(0) = -2\arccos(l), \qquad \lim_{x\to\infty} u(x) = 0. \tag{5}$$

Задачі (4), (5) розв'язували чисельно за допомогою триточкової різницевої схеми 6-го порядку точності. Результати розв'язування задач (4), (5) наведено в таблиці.

ε	*N*	*NFUN*	*er*
10^{-3}	7	1272	$0{,}499\cdot 10^{-4}$
10^{-5}	23	4992	$0{,}171\cdot 10^{-6}$
10^{-7}	62	16404	$0{,}246\cdot 10^{-8}$
10^{-9}	249	2256084	$0{,}786\cdot 10^{-11}$

Отже, за допомогою заміни змінних крайову задачу для нелінійного рівняння Клейна-Гордона (1), (3) зведено до крайової задачі для звичайного диференціального рівняння. Особливістю задачі є безмежність інтервалу, на якому вона розглядається, а тому для її чисельного розв'язування необхідно використовувати такі різницеві схеми, які для крайових задач на безмежному інтервалі записуються на скінченній сітці та для яких отримано оцінку точності.

М. Санчин

Науковий керівник – канд. фіз.-мат. наук, ст. викл. З.О. Когут

ТЕХНІЧНІ ТА ТЕОРЕТИЧНІ АСПЕКТИ ВИКОРИСТАННЯ ГЕОТЕРМАЛЬНОЇ ЕНЕРГІЇ В УКРАЇНІ

Загострення проблеми охорони довкілля на фоні зростаючого попиту на паливо та енергію спонукає світову спільноту до ефективного пошуку нових енергетичних технологій, які б забезпечували прийнятний рівень забруднення і одночасно не уповільнювали економічне зростання. Належне місце в вирішенні цієї проблеми мають зайняти так звані поновлювані види енергії. У цій роботі, для часткового вирішення