

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ  
ФЕДЕРАЦИИ

федеральное государственное автономное образовательное учреждение  
высшего образования

УРАЛЬСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ  
имени первого Президента России Б. Н. Ельцина

ИНСТИТУТ ЕСТЕСТВЕННЫХ НАУК И МАТЕМАТИКИ

Кафедра теоретической и математической физики

**ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИЧЕСКОГО МАГНИТНОГО ОТКЛИКА  
КОНЦЕНТРИРОВАННЫХ ФЕРРОЖИДКОСТЕЙ ВО ВНЕШНЕМ ПОСТОЯННОМ  
МАГНИТНОМ ПОЛЕ**

Направление подготовки 01.04.01 «Современные проблемы математики»

Зав. кафедрой:  
д. ф.-м. н., доц. Е. А. Елфимова

Магистерская диссертация  
**Кузнецова  
Михаила Алексеевича**

Нормоконтролер:  
к. ф.-м. н. Е. С. Пьянзина

Научный руководитель:  
д. ф.-м. н., доц. Е. А. Елфимова

Екатеринбург

2022

## РЕФЕРАТ

**Объём и структура работы.** Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения и одного приложения. Полный объём диссертации составляет **46** страниц с **21** рисунком. Список литературы содержит **15** наименований.

**Ключевые слова:** ФЕРРОМАГНИТНАЯ ЖИДКОСТЬ, УРАВНЕНИЕ ФОККЕРА-ПЛАНКА, МАГНИТНЫЙ МОМЕНТ, ПЛОТНОСТЬ ВЕРОЯТНОСТИ, НАМАГНИЧЕННОСТЬ, ДИНАМИЧЕСКАЯ ВОСПРИИМЧИВОСТЬ.

**Цель данной работы:** определить влияние межчастичных диполь-дипольных взаимодействий на динамическую восприимчивость феррожидкости, а также показать, как влияет интенсивность параллельно направленных переменного магнитного поля и постоянного подмагничивающего поля на магнитный отклик феррожидкости.

## МЕСТО ВЫПОЛНЕНИЯ РАБОТЫ

В магистерской диссертации приведены результаты исследований, проводившихся под руководством д. ф.-м. н., доц. Е.А. Елфимовой на кафедре теоретической и математической физики федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина».

## ОБОЗНАЧЕНИЯ И СОКРАЩЕНИЯ

- $\chi$  – магнитная восприимчивость;
- $\chi_L$  – восприимчивость Ланжевена;
- $\omega$  – угловая частота поля;
- $W$  – плотность вероятности ориентации магнитного момента;
- $\rho$  – числовая концентрация магнитных частиц;
- $\mu_0$  – магнитная проницаемость вакуума;
- $M$  – намагниченность;
- $\tau$  – время релаксации магнитного момента;
- $k_B$  – постоянная Больцмана;
- $T$  – температура.

## СОДЕРЖАНИЕ

Введение .....	6
Обзор литературы .....	8
Глава 1. Математическая модель .....	10
Глава 2. Численная схема для уравнения Фоккера-Планка .....	14
Глава 3. Аналитические формулы расчета динамической воспри- имчивости .....	20
Глава 4. Сравнение полученных численных результатов с суще- ствующей теорией .....	24
Глава 5. Представление полученных результатов .....	29
Заключение .....	33
Список использованных источников и литературы .....	34
Приложение .....	36

## ВВЕДЕНИЕ

Работа посвящена исследованию свойств феррожидкостей, которые представляют собой дисперсии однодоменных частиц магнитного материала в жидких немагнитных носителях. Феррожидкости (ферроколлоиды, магнитные жидкости) впервые были синтезированы приблизительно в 60 годах XX века. Целью данного синтеза было получение жидкостного топлива, которым можно управлять, а именно, благодаря магнитным полям подавать топливо из бака в ракетный двигатель в условиях отсутствия силы тяжести (невесомости). Существует достаточно прикладных изделий на основе феррожидкостей. Магнитные жидкости используются в качестве герметиков, полупроводников, в процессах напыления, в рентген-установках, двигателях и прочего. Рассматривается возможность применения ферромагнитных жидкостей в области медицины: для точной доставки лекарств; для физического воздействия на очаг, например нагревания опухоли; медицинской диагностики. Уникальность свойств феррожидкостей заключается в возможности взаимодействовать с магнитными полями одновременно будучи текучими. Характерный диаметр частиц в феррожидкости порядка  $\sim 10$  нм и каждая частица обладает собственным магнитным моментом.

В работе изучается динамическая восприимчивость феррожидкости, которая моделируется ансамблем взаимодействующих подвижных магнитных частиц. Предполагается, что система находится в постоянном и переменном магнитном поле, направленных параллельно друг другу.

Цель данной работы: определить влияние межчастичных диполь-дипольных взаимодействий на динамическую восприимчивость феррожидкости, а также показать, как влияет интенсивность параллельно направленных

переменного магнитного поля и постоянного подмагничивающего поля на магнитный отклик феррожидкости.

В ходе исследования решаются следующие задачи:

1. Построение численной схемы уравнения Фоккера-Планка, учитывающей межчастичные взаимодействия.
2. Определение динамической восприимчивости феррожидкости, находящейся в постоянном подмагничивающем поле и переменном магнитном поле, при помощи численных расчетов.
3. Тестирование численных результатов в предельных случаях для известных аналитических теорий с целью подтверждения корректности полученной модели.
4. Анализ и установление зависимостей магнитного отклика от амплитуды прикладываемых полей и интенсивности межчастичных взаимодействий.

## ОБЗОР ЛИТЕРАТУРЫ

Первые упоминания о синтезе феррожидкости, а также описания их характеристик появляются уже во второй половине XX века. Так, в работе [1] приводится описание методов синтеза магнитных частиц и рассматривается проблема их агрегативной стабильности в феррожидкости, кроме того в работе проводятся теоретические и экспериментальные исследования влияния магнитного поля на характер движения суспензий магнитных частиц, обсуждается механизм релаксации магнитного момента.

В последние десятилетия стала заметна определенная тенденция в развитии прикладной части науки о феррожидкостях. Многие способы применения феррожидкостей запатентованы и вышли на рынок высоких технологий [2]. В частности, использование феррожидкостей и феррогелей в магнитоиндукционной гипертермии – бурно развивающееся в последние годы направление в лечении злокачественных новообразований [3, 4]. Метод основан на внедрении магнитных наночастиц в жидкой или гелеобразной матрице в опухолевую область с последующим их нагревом переменным магнитным полем. Применение феррожидкостей и феррогелей в магнитоиндукционной гипертермии диктует потребность фундаментальных исследований особенностей их поведения в переменном магнитном поле. Необходимо развитие теоретических методов расчета основных характеристик процесса поглощения энергии переменных полей этими материалами, исходя из информации о размере, концентрации и физических свойствах наполняющих их частиц, типе несущей матрице, частоты переменного магнитного поля.

В статьях [5, 6, 7] исследуется, как можно оптимизировать выделение тепла магнитными наночастицами. Изучена зависимость магнитной восприимчивости

от размера частиц, и экспериментально получены ограничения на амплитуды и частоты прикладываемых полей.

Опубликовано большое количество статей, в которых представлены данные экспериментов с феррожидкостью [8, 9, 10]. В каждой из описываемых статей рассматриваются изменения только некоторых характеристик магнитной жидкости и прикладываемых полей. Например, подбор оптимального размера наночастиц для магнитной гипертермии или влияние частоты или амплитуды поля на характеристики магнитного поля. В свою очередь, недостаточно исследованы ситуации, когда учитываются межчастичные взаимодействия, а также одновременно действуют переменное и постоянное магнитные поля.

В данной магистерской диссертации моделируется и исследуется феррожидкость, находящаяся под воздействием направленных параллельно переменного магнитного поля и постоянного подмагничивающего поля. Построенная теория учитывает взаимодействия между частицами и может прогнозировать динамический магнитный отклик системы для любых амплитуд переменного поля и интенсивности постоянного магнитного поля.

## ГЛАВА 1. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

Феррожидкость моделируется системой из  $N$  сферических магнитных частиц одинакового диаметра, равномерно распределенных в некотором объеме  $V$ . Направление каждого  $i$ -го магнитного момента описывается вектором  $\vec{m}_i = m\hat{m}_i = m(\sin\theta_i \cos\phi_i, \sin\theta_i \sin\phi_i, \cos\theta_i)$ , где  $\theta$  – полярный угол,  $\phi$  – азимутальный угол,  $m$  – модуль магнитного момента. Положение центра  $i$ -ой частицы определяется радиус вектором  $\vec{r}_i = r\hat{r}_i$ , где  $\hat{r}_i = (\sin\xi_i \cos\psi_i, \sin\xi_i \sin\psi_i, \cos\xi_i)$ .

Предполагается, что рассматриваемая система помещена в длинную цилиндрическую трубку радиуса  $R$ , главная ось которой ориентирована вдоль оси  $Oz$ . На систему частиц действуют магнитные поля, направленные вдоль оси  $Oz$ : переменное магнитное поле  $\vec{H}_{ac} = h_{ac} \cos(\omega t) \hat{H}$  и постоянное подмагничивающее магнитное поле  $\vec{H}_{dc} = h_{dc} \hat{H}$ . Напряженность внешнего переменного магнитного поля и постоянного поля обозначаются, соответственно, как  $h_{ac}$  и  $h_{dc}$ ,  $\omega$  – угловая частота поля,  $t$  – время,  $\hat{H} = (0, 0, 1)$ .

Энергия взаимодействия  $i$ -ой частицы с внешними магнитными полями задается следующим образом:

$$U_H = -\mu_0(\vec{m}_i \cdot \vec{H}_{ac}) - \mu_0(\vec{m}_i \cdot \vec{H}_{dc}) = -\mu_0 m \cos\theta_i (h_{ac} \cos(\omega t) + h_{dc}). \quad (1)$$

где  $\mu_0$  – магнитная постоянная,  $\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7}$  Гн/м.

Потенциальная энергия диполь-дипольного взаимодействия между случайно выбранными частицами  $i$  и  $j$  имеет вид:

$$U_d(i, j) = \frac{\mu_0}{4\pi k_B T} \left( 3 \frac{(\vec{m}_i \cdot \vec{r}_{ij})(\vec{m}_j \cdot \vec{r}_{ij})}{r^5} - \frac{\vec{m}_i \cdot \vec{m}_j}{r^3} \right). \quad (2)$$

Здесь  $k_B$  – постоянная Больцмана,  $k_B = 1.38 \times 10^{-23}$  Дж/К,  $T$  – температура.

Этот потенциал зависит от расстояния между центрами двух частиц  $\vec{r}_{ij} = \vec{r}_j - \vec{r}_i = r_{ij}\hat{r}_{ij}$  и от взаимной ориентации магнитных моментов.

Так как Неелевское время релаксации магнитного момента в динамике однодоменных магнитных частиц значительно больше Броуновского времени релаксации, мы считаем, что релаксация магнитного момента частиц происходит только по Броуновскому механизму и определяется формулой  $\tau_B = \eta\pi(d + 2l)^3/2k_B T$ , где  $\eta$  – вязкость среды,  $l$  – ширина слоя, покрывающего частицы. Поскольку система имеет симметрию, ориентация магнитного момента описывается только полярным углом  $\theta$ . Вращательное движение магнитного момента случайно выбранной частицы описывается плотностью вероятности ориентации магнитного момента, которая может быть описана при помощи функции  $W = W(t, x)$ , где  $x = \cos\theta$ .  $W(t, x)$  можно определить, решив уравнение Фоккера-Планка:

$$2\tau_B \frac{\partial W}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[ (1 - x^2) \left( \frac{\partial W}{\partial x} - W \frac{\partial U}{\partial x} \right) \right], \quad (3)$$

Здесь  $U$  – это потенциальная энергия частицы в единицах тепловой энергии  $k_B T$ .

В качестве граничных условий для решения уравнения (3) функция плотности вероятности  $W(t, x)$  должна удовлетворять следующему условию нормировки:

$$\int_{-1}^1 W(t, x) dx = 1. \quad (4)$$

В случае, когда не учитываются межчастичные взаимодействия (идеаль-

ный случай), потенциальная энергия случайно выбранной частицы имеет вид:

$$U_{id} = \frac{1}{k_B T} U_H = -\alpha_{ac} \cos(\omega t)x - \alpha_{dc}x \quad (5)$$

где  $\alpha_{ac} = \mu_0 h_{ac} m / k_B T$  – коэффициент отвечающий за интенсивность переменного магнитного поля,  $\alpha_{dc} = \mu_0 h_{dc} m / k_B T$  – коэффициент отвечающий за интенсивность подмагничивающего постоянного магнитного поля.

Для учета межчастичного диполь-дипольного взаимодействия воспользуемся результатом статьи [11], где одночастичная энергия  $U_{id}$  была расширена за счет включения межчастичных диполь-дипольных взаимодействий на основе модифицированной теории среднего поля первого порядка:

$$U = U_{int} = \frac{1}{k_B T} (U_H + \rho \langle U_d(1, 2) W_{id}(2) \Theta(1, 2) \rangle_2). \quad (6)$$

Здесь  $\rho$  – числовая концентрация магнитных частиц,  $W_{id}(2) = W_{id}(t, x_2)$  – плотность вероятности ориентации магнитного момента частицы с номером два в идеальной системе.  $\Theta(1, 2)$  – функция Хевисайда, которая обеспечивает условие непроницаемости частиц и является кусочно-постоянной функцией, которая равна нулю для отрицательных значений аргумента и единице — для положительных. Угловые скобки  $\langle \dots \rangle_2$  обозначают усреднение по всем ориентациям

магнитного момента второй частицы и определяется формулой [11]:

$$\begin{aligned}
\langle U_d(1, 2)W^{id}(2) \rangle_2 &= \int d\hat{m}_2 \int d\hat{r}_2 U_d(1, 2)W^{id}(2); \\
\int d\hat{m}_2 &= \frac{1}{4\pi} \int_{-1}^1 dx_2 \int_0^{2\pi} d\phi_2; \\
\int d\hat{r}_2 &= \lim_{R \rightarrow \infty} \int_0^{2\pi} d\psi_2 \int_0^\pi \sin \xi_2 d\xi_2 \int_d^{\frac{R}{\sin \xi_2}} r_2^2 dr_2.
\end{aligned} \tag{7}$$

Подставив результат интегрирования (7) в (6), мы получаем:

$$U = U_{int} = - \left[ \alpha_{dc} + \alpha_{ac} \cos(\omega t) + \frac{\chi_L}{2} \int_{-1}^1 W_{id}(t, x_2) x_2 dx_2 \right] x. \tag{8}$$

Полученная потенциальная энергия (8) имеет первый порядок по восприимчивости Ланжевена  $\chi_L = \mu_0 \rho m^2 / 3k_B T$ .

Намагниченность определяется одночастичной плотностью вероятности  $W(t, x)$ :

$$M(t) = \rho m \int d\hat{m}_1 (\hat{m}_1 \cdot \hat{H}) W(t, x) = \frac{\rho m}{2} \int_{-1}^1 x W(t, x) dx. \tag{9}$$

Действительная  $\chi'$  и мнимая  $\chi''$  часть динамической восприимчивости определяются как первый член ряда Фурье функции  $M(t)$ :

$$\begin{aligned}
\chi' &= \frac{\omega}{\pi h} \int_0^{\frac{2\pi}{\omega}} M(t) \cos(\omega t) dt; \\
\chi'' &= \frac{\omega}{\pi h} \int_0^{\frac{2\pi}{\omega}} M(t) \sin(\omega t) dt.
\end{aligned} \tag{10}$$

## ГЛАВА 2. ЧИСЛЕННАЯ СХЕМА ДЛЯ УРАВНЕНИЯ ФОККЕРА-ПЛАНКА

Как уже было сказано в главе 1, чтобы найти плотность вероятности ориентации магнитного момента  $W(t, x)$ , необходимо решить уравнение Фоккера-Планка (3). Уравнение Фоккера-Планка является дифференциальным уравнением в частных производных параболического типа. Оно может быть решено аналитически в ряде частных случаев. Обычно, численное решение уравнения Фоккера-Планка основано на разложении искомой функции  $W(t, \theta)$  в ряд по собственным функциям и численном вычислении конечного числа членов этого ряда, зависящего от параметров системы.

Для решения (3) будет использоваться конечно-разностная схема, впервые предложенная в статье [12] и применяемая к задачам конвекции-диффузии. Мы рассматриваем первый член правой части уравнения (3) как диффузионный член, а второй – как конвекционный. В таком случае можно применять предложенную численную схему для данного уравнения. В статье [12] также приводится доказательство критерия сходимости к решению, соответственно полученное при помощи данной схемы решение является стабильным.

Для приближенного решения уравнения в двумерном пространстве  $(t, x)$  будем использовать равномерную сетку:

$$\{(t_k, x_i) \mid t_k = t_{k-1} + h_t, x_k = x_{k-1} + h_x, t_0 = 0, x_0 = -1 + \frac{h_x}{2}\}$$

с конечным числом точек пересечения. Значения величин  $h_x$  и  $h_t$  отвечают за размер ячеек сетки по осям  $x$  и  $t$  соответственно. Индексы  $k$  и  $i$  варьируются от нуля до значений, соответственно равных:  $N_t = \frac{T_f}{h_t}$ ,  $N_x = \frac{2}{h_x} - 1$ , где  $T_f$  является

временем завершения моделирования процесса.

Уравнение (3) представляется в дифференциально-операторном виде:

$$\frac{dW}{dt} + \mathcal{A}W = f(t), \quad (11)$$

$$\mathcal{A} = \mathcal{C}(t) + \mathcal{D}, \quad 0 < t \leq T.$$

Где  $\mathcal{D}$  - оператор диффузионного переноса, который определяется выражением

$$\mathcal{D}W = -\frac{\partial}{\partial x} \left( k(x) \frac{\partial W}{\partial x} \right),$$

а  $\mathcal{C}$  - это оператор конвекционного переноса. Он равен:

$$\mathcal{C}W = \frac{\partial}{\partial x} (v(t, x) W).$$

Переобозначим плотность вероятности ориентации магнитного момента таким образом:  $W(t_k, x_i) = W_{k,i}$ .

Для узлов сеточный оператор  $\mathcal{D}$  принимает вид:

$$\mathcal{D}W_{k,i} = \frac{1}{h_x^2} \left( -k(x_i + \frac{h_x}{2})(W_{k,i+1} - W_{k,i}) + k(x_i - \frac{h_x}{2})(W_{k,i} - W_{k,i-1}) \right), \quad (12)$$

а оператор  $\mathcal{C}$ :

$$\begin{aligned} \mathcal{C}W_{k,i} = & \frac{1}{2h_x} \left( v(t^*, x + \frac{h_x}{2})(W_{k,i+1} + W_{k,i}) \right) - \\ & - \frac{1}{2h_x} \left( v(t^*, x + \frac{h_x}{2})(W_{k,i+1} + W_{k,i-1}) \right). \end{aligned} \quad (13)$$

Здесь

$$k(x) = 1 - x^2,$$

$$t^* = \frac{t_{k+1} + t_k}{2},$$

$$v(x) = \frac{\partial U}{\partial x} k(x) .$$

Используя эти выкладки, произведем операторные операции, описанные в работе [12], и представим уравнение (3) в дискретном виде:

$$\frac{\exp(-\delta h_t) W_{k,i} - W_{k-1,i}}{h_t} + (C + D + \delta) (\exp(-\delta h_t) W_{k,i}) = 0 . \quad (14)$$

Коэффициент  $i$  принимает значения от 0 до  $N_x$ .

В уравнении (14)  $\delta$  является параметром регуляризации, который используется для обеспечения безусловной устойчивости численной схемы. Он равен  $\frac{1}{2} \max |v'_x|$ .

Подставим вместо соответствующих операторов (12) и (13) и временно умножим на  $\exp(\delta h_t)$ . Получаем:

$$\begin{aligned} & \frac{W_{k,i} - \exp(\delta h_t) W_{k-1,i}}{h_t} + \\ & + \frac{1}{h_x^2} \left( -k(x_i + 0.5h_x)(W_{k,i+1} - W_{k,i}) + k(x_i - 0.5h_x)(W_{k,i} - W_{k,i-1}) \right) + \\ & + \frac{1}{2h_x} \left( v(t^*, x + 0.5h_x)(W_{k,i+1} + W_{k,i}) - \right. \\ & \left. - \frac{1}{2h_x} (v(t^*, x - 0.5h_x)(W_{k,i} + W_{k,i-1})) + \delta W_{k,i} = 0 . \right. \end{aligned} \quad (15)$$

Сведем (15) к трехдиагональной системе:

$$\begin{aligned}
& \left( -\frac{1}{h_x^2}k(x_i - 0.5h_x) - \frac{1}{2h_x}v(t^*, x_i - 0.5h_x) \right) W_{k,i-1} + \\
& \quad + \left( \frac{1}{h_t} + \frac{1}{h_x^2}k(x_i + 0.5h_x) + \frac{1}{h_x^2}k(x_i - 0.5h_x) + \right. \\
& \quad \left. + \frac{1}{2h_x}v(t^*, x_i + 0.5h_x) - \frac{1}{2h_x}v(t^*, x_i - 0.5h_x) + \delta \right) W_{k,i} + \\
& \left( -\frac{1}{h_x^2}k(x_i + 0.5h_x) + \frac{1}{2h_x}v(t^*, x_i + 0.5h_x) \right) W_{k,i+1} = W_{k-1,i} \frac{\exp(\delta h_t)}{h_t}.
\end{aligned} \tag{16}$$

Умножим (16) на  $\left( \frac{h_x^2 \exp(\delta h_t)}{h_t} \right)^{-1}$ , придем к итоговой форме уравнения (3) в трехдиагональном виде:

$$\begin{aligned}
& \exp(-\delta h_t) \left( -k(x_i + 0.5h_x) - \frac{h_x}{2}v(t^*, x_i + 0.5h_x) \right) W_{k,i-1} + \\
& \quad + \exp(-\delta h_t) \left( h_x^2(1 + \delta h_t) + h_t(k(x_i + 0.5h_x) + \right. \\
& \quad \left. + k(x_i - 0.5h_x) + \frac{h_x}{2}v(t^*, x_i + 0.5h_x) - \frac{h_x}{2}v(t^*, x_i - 0.5h_x)) \right) W_{k,i} + \\
& \exp(-\delta h_t) \left( -k(x_i + 0.5h_x) + \frac{h_x}{2}v(t^*, x_i + 0.5h_x) \right) W_{k,i+1} = \tilde{W}_{k-1,i} h_x^2.
\end{aligned} \tag{17}$$

Преобразованное уравнения Фокера-Планка (17) также может быть записано в матричном виде, а именно как трехдиагональная матрица. Соответственно, матрица системы эффективно решается методом прогонки. Для удовлетворения условия (4) проводится нормировка:

$$W_{k,i}^{norm} = \frac{W_{k,i}}{h_x \sum_{i=0}^{N_x-1} W_{k,i}}. \tag{18}$$

Следовательно,

$$h_x \sum_{i=0}^{N_x-1} W_{k,i}^{norm} = 1. \tag{19}$$

Для моделирования в начальный момент времени  $W_{k,i}$  заполняется единицами по координатно.

Пользуясь численным методом прогонки, решаем уравнение (17). Для этого рассчитываем прогоночные коэффициенты  $\lambda_{i+1} = -\frac{c_i}{a_i\lambda_i+b_i}$  и  $\mu_{i+1} = \frac{d_i-\mu_i a_i}{a_i\lambda_i+b_i}$ , где в качестве сокращения внутренние коэффициенты соответственно равны:

$$\begin{aligned} a_i &= \exp(-\delta h_t) h_t \left( -k \left( x_i - \frac{h_x}{2} \right) + \frac{h_x}{2} \right); \\ b_i &= \exp(-\delta h_t) h_t \left( h_x^2 (1 + \delta h_t) + h_t \left( k \left( x_i + \frac{h_x}{2} \right) + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + k \left( x_i + \frac{h_x}{2} \right) + \frac{h_x}{2} v(t^*, x_i + \frac{h_x}{2}) - \frac{h_x}{2} v(t^*, x_i - \frac{h_x}{2}) \right) \right); \\ c_i &= \exp(-\delta h_t) h_t \left( -k \left( x_i + \frac{h_x}{2} \right) + \frac{h_x}{2} v(t^*, x_i + \frac{h_x}{2}) \right) \end{aligned} \quad (20)$$

Значения шага по  $t$  и по  $x$ :  $h_t = 0.01$ ,  $h_x = 0.01$ ,  $x \in [-1, 1]$  и  $t \in [0, \frac{4\pi}{r}]$ .

Затем, используя известную формулу  $x_{i-1} = \lambda_i x_i + \mu_i$ , получаем плотность вероятности  $W_k(x)$  (другая допустимая запись  $W_{k,j}$ ) ориентации магнитного момента в определенный момент времени  $t_j$ .

Намагниченность  $M$  системы магнитных частиц определяется как проекция магнитного момента случайно выбранной частицы  $\hat{m}_1$  на направление магнитного поля  $\hat{H} = (0, 0, 1)$ , средневзвешенная с помощью одночастичной плотности вероятности  $W(1)$  и усредненная по всем возможным ориентациям:

$$M(t) = \rho m \int (\hat{m}_1 \cdot \hat{H}) W(1) d\hat{m}_1. \quad (21)$$

Динамическая восприимчивость  $\chi$  определяется как первый член ряда Фурье по  $M(t)$ :

$$\chi(\omega) = \frac{\omega}{2\pi H} \int_0^{\frac{2\pi}{\omega}} M(t) e^{i\omega t} dt. \quad (22)$$

В свою очередь действительная  $Re(\chi)$  и мнимая  $Im(\chi)$  части восприимчивости находятся численным интегрированием в каждый момент времени  $\{t_k\}$ :

$$\begin{aligned}\chi' = Re(\chi) &= \frac{\omega}{\pi H} \int_0^{\frac{2\pi}{\omega}} M(t) \cos(\omega t) dt, \quad t \in \{t_k\}; \\ \chi'' = Im(\chi) &= \frac{\omega}{\pi H} \int_0^{\frac{2\pi}{\omega}} M(t) \sin(\omega t) dt, \quad t \in \{t_k\}.\end{aligned}\tag{23}$$

Интегралы от дискретной функции  $W_{k,i}^{norm}$  (18) в формулах намагниченности и динамической восприимчивости вычисляются методом трапеций.

### ГЛАВА 3. АНАЛИТИЧЕСКИЕ ФОРМУЛЫ РАСЧЕТА ДИНАМИЧЕСКОЙ ВОСПРИИМЧИВОСТИ

Известные экспериментальные и теоретические результаты динамического отклика феррожидкости на переменное и постоянное магнитные поля демонстрируют сильную зависимость динамической восприимчивости от амплитуды полей и межчастичных диполь-дипольных взаимодействий. Однако область высоких амплитуд переменного и постоянного магнитных полей, обозначенная на рисунке 3.1 знаком вопроса, пока недостаточно изучена. Соответственно, целью данной работы является восполнение этого пробела, то есть численный расчет динамической восприимчивости в зависимости от амплитуды переменного магнитного поля и интенсивности постоянного подмагничивающего поля с учетом межчастичных диполь-дипольных взаимодействий.

	$\alpha_{dc} = 0$	$\alpha_{dc} > 0$
$\alpha_{ac} > 0.1$	<b>Теория</b> [T. Yoshida, K. Enpuku // Japanese Journal of Applied Physics 2009] <i>(без взаимодействий)</i>	<b>?</b>
	<b>Теория</b> [M. Rusanov, E. Elfimova, V. Zverev // Physical Review E 2021]	
$\alpha_{ac} \ll 1$	<b>Теория</b> [J. Sindt, P. Camp, S. Kantorovich, E. Elfimova, A. Ivanov // Physical Review E 2016]	<b>Аналитические расчеты</b> [M. Batrudinov, Y. Nekhoroshkova, E. Paramonov, V. Zverev, E. Elfimova, A. Ivanov, P. Camp // Physical Review E 2018]

Рисунок 3.1 – Схема имеющихся знаний о динамической восприимчивости феррожидкости

Для того, чтобы проверить корректность полученных в магистерской диссертации данных численного моделирования динамической восприимчивости феррожидкости, было проведено тестирование полученных численных данных на расчетах динамической восприимчивости, произведенных при помощи аналитических формул из статей, описанных на рисунке 3.1.

В статье [13] приведены формулы для расчета динамической восприимчивости системы подвижных взаимодействующих магнитных частиц, находящихся под действием слабого переменного магнитного поля малых амплитуд, учитывающие межчастичные диполь-дипольные взаимодействия.

$$\begin{aligned}
\chi'_D(\omega) &= \frac{\chi_L}{1 + (\omega\tau_B)^2}, \\
\chi''_D(\omega) &= \frac{\chi_L(\omega\tau_B)}{1 + (\omega\tau_B)^2}, \\
\chi'(\omega) &= \chi'_D(\omega) + \frac{1}{3}([\chi'_D(\omega)]^2 - [\chi''_D(\omega)]^2), \\
\chi'(\omega) &= \chi''_D(\omega)[1 + \frac{2}{3}\chi'_D(\omega)].
\end{aligned} \tag{24}$$

где  $\tau_B$  – Броуновское время релаксации магнитного момента.

Авторами статьи [14] была получена аналитическая формула, используемая для определения динамической восприимчивости феррожидкости с учетом межчастичных взаимодействий, находящейся в переменном магнитном поле больших амплитуд:

$$\begin{aligned}
\chi'(\omega) &= \frac{\chi_0}{1 + (\omega\tau_e)^2}, \\
\chi''(\omega) &= k \frac{\chi_0(\omega\tau_e)}{1 + (\omega\tau_e)^2}, \\
\chi_0 &= \chi_L \left(1 + \frac{\chi_L}{3}\right) \left(1 - \frac{0.101\alpha_{ac}^2}{1 + 0.276\alpha_{ac} + 0.104\alpha_{ac}^2}\right), \\
\frac{1}{\tau_e} &= \frac{1}{\tau_B} \sqrt{\left(1 - \frac{\chi_L}{3}\right)^2 + 0.076\alpha_{ac}^2}, \\
k &= 1 + \frac{0.027\alpha_{ac}^2}{1 + 0.102\alpha_{ac} + 0.047\alpha_{ac}^2}.
\end{aligned} \tag{25}$$

Для определения динамической восприимчивости системы подвижных взаимодействующих магнитных частиц, находящихся под действием переменного магнитного поля фиксированной амплитуды и постоянного поля использова-

лись данные из статьи [15].

Для случая без учета межчастичного взаимодействия:

$$\chi^{id} = \chi_L Z_1^{id}, \quad (26)$$

где

$$Z_1^{id} = G(\alpha_{dc}, \omega\tau_B).$$

Для ситуации, когда мы учитываем диполь-дипольные взаимодействия, равенства принимаю следующий вид:

$$\chi = \chi_L Z_1, \quad (27)$$

$$Z_1 = G(\bar{\alpha}_{dc}, \omega\tau_B) \left(1 + \frac{1}{3} \chi_L Z_1^{id}\right).$$

Функция  $G(a, b)$  представляется в виде:

$$G(a, b) = \frac{\tilde{D}(a, b)}{D(a, b)}.$$

$\tilde{D}(a, b)$  и  $D(a, b)$  являются определителями, определяемыми следующим образом:

$$D(a, b) = \begin{vmatrix} 2(1+ib) & \frac{2a}{5} & 0 & 0 & 0 \\ -2a & 2(3+ib) & \frac{6a}{7} & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{12a}{5} & 2(6+ib) & \frac{4a}{3} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{20a}{7} & 2(10+ib) & \frac{20a}{11} \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{20a}{3} & 2(15+ib) \end{vmatrix},$$

$$\tilde{D}(a, b) = \begin{vmatrix} -\frac{3}{2}F_1(a) & \frac{2a}{5} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{5}{2}F_2(a) & 2(3 + ib) & \frac{6a}{7} & 0 & 0 \\ -\frac{7}{2}F_3(a) & -\frac{12a}{5} & 2(6 + ib) & \frac{4a}{3} & 0 \\ -\frac{9}{2}F_4(a) & 0 & -\frac{20a}{7} & 2(10 + ib) & \frac{20a}{11} \\ -\frac{11}{2}F_5(a) & 0 & 0 & -\frac{10a}{3} & 2(15 + ib) \end{vmatrix}.$$

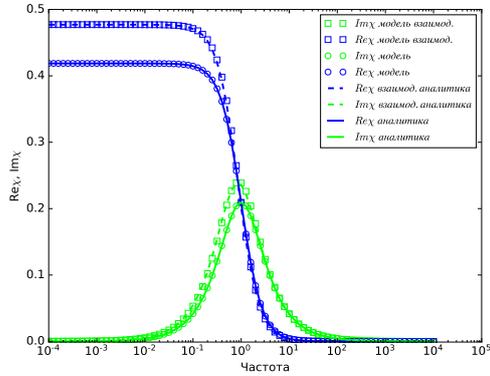
Для  $F_i(a)$  в  $\tilde{D}(a, b)$  явные выражения приняты в виде:

$$\begin{aligned} F_1(a) &= -\frac{4L(a)}{a}; \\ F_2(a) &= -\frac{12L_3(a)}{a}; \\ F_3(a) &= -24 \left[ \frac{L(a)}{a} - \frac{5L_3(a)}{a^2} \right]; \\ F_4(a) &= 10 \left[ \frac{10L(a)}{a^2} - \frac{1}{a} - \frac{35L_3(a)}{a^3} \right]; \\ F_5(a) &= 60 \left[ \frac{14}{a^2} - \frac{L(a)}{a} - \frac{105L(a)}{a^3} + \frac{315L_3(a)}{a^4} \right]; \\ L(a) &= \coth a - \frac{1}{a}; \\ L_3(a) &= 1 - \frac{3L(a)}{a}. \end{aligned}$$

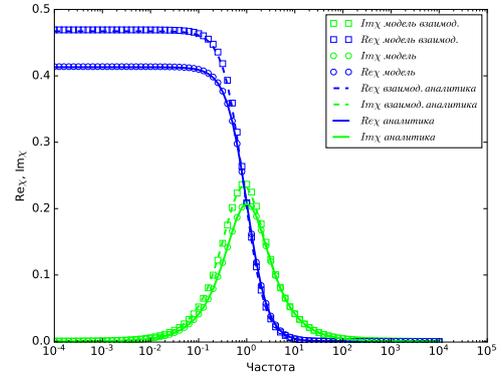
Для случаев  $a = b = 0$ ,  $F_1(0) = -\frac{4}{3}$ ,  $F_{n>1}(0) = 0$ ,  $D(0, 0) = \tilde{D}(0, 0) = 2 \times 6 \times 12 \times 20 \times 30$ , и, как следствие,  $G(0, 0) = 1$ .

Представленные в настоящем разделе формулы будут использованы в главе 4 для тестирования численных результатов динамической восприимчивости, полученных в диссертации.

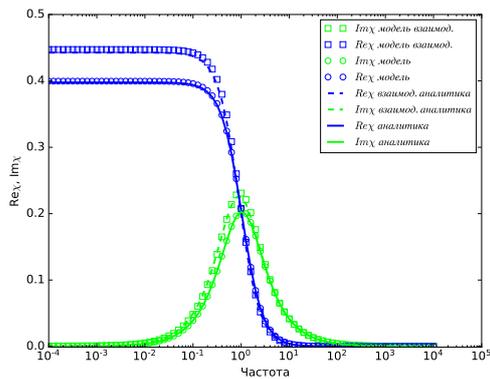
## ГЛАВА 4. СРАВНЕНИЕ ПОЛУЧЕННЫХ ЧИСЛЕННЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ С СУЩЕСТВУЮЩЕЙ ТЕОРИЕЙ



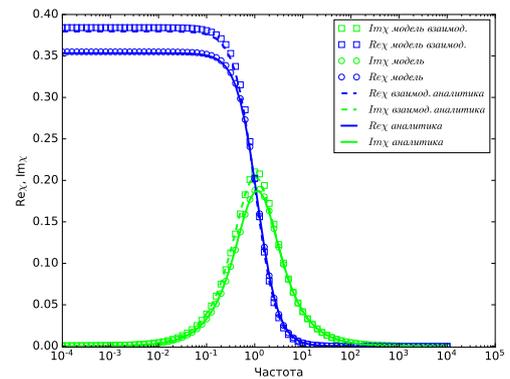
(a)  $\alpha_{ac} = 0.1$ ;  $\alpha_{dc} = 0$ ;  $\chi_L = 0.419$



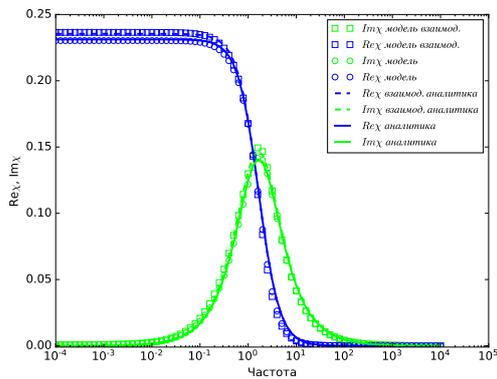
(b)  $\alpha_{ac} = 0.5$ ;  $\alpha_{dc} = 0$ ;  $\chi_L = 0.419$



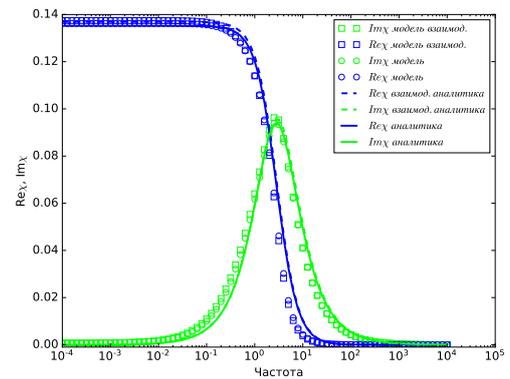
(c)  $\alpha_{ac} = 1$ ;  $\alpha_{dc} = 0$ ;  $\chi_L = 0.419$



(d)  $\alpha_{ac} = 2$ ;  $\alpha_{dc} = 0$ ;  $\chi_L = 0.419$



(e)  $\alpha_{ac} = 5$ ;  $\alpha_{dc} = 0$ ;  $\chi_L = 0.419$



(f)  $\alpha_{ac} = 10$ ;  $\alpha_{dc} = 0$ ;  $\chi_L = 0.419$

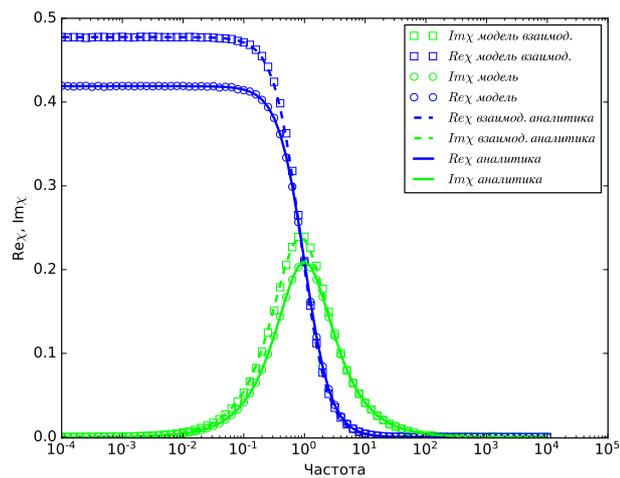
Рисунок 4.1 – Магнитная восприимчивость в зависимости от частоты переменного поля. Сравнение численных результатов с теорией (25)

На рисунке 4.1 представлены результаты численного моделирования для

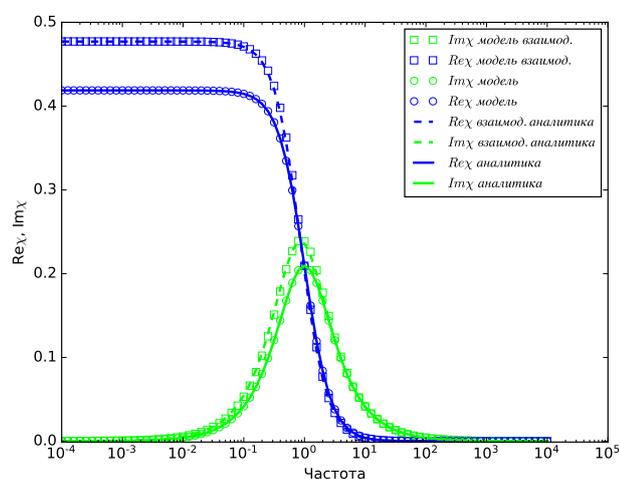
системы с  $\chi_L = 0.419$ ,  $\alpha_{dc} = 0$ ,  $\alpha_{ac} = 0.1, 0.5, 1, 2, 5, 10$  в отсутствии постоянного магнитного поля. Моделирование было проведено для ансамбля взаимодействующих частиц – не закрашенные квадратные маркеры синего цвета для действительной части и зеленого цвета для мнимой части динамической восприимчивости, а также без учета взаимодействий – не закрашенные круглые маркеры маркеры синего цвета для действительной части и зеленого цвета для мнимой части динамической восприимчивости. Пунктирной линией для случая взаимодействующих частиц и непрерывной для идеальной системы на рисунке показаны аналитические решения для формулы (25). Наблюдается хорошее согласие численных и аналитических результатов в случае отсутствия постоянного поля.

На рисунке 4.2 представлены результаты численного моделирования для системы с  $\chi_L = 0.419$ ,  $\alpha_{dc} = 0$ , при малых  $\alpha_{ac} = 0.01, 0.1, 0.5$  в отсутствии постоянного магнитного поля. Моделирование было проведено для ансамбля взаимодействующих частиц – не закрашенные квадратные маркеры синего цвета для действительной части и зеленого цвета для мнимой части динамической восприимчивости, а также без учета взаимодействий – не закрашенные круглые маркеры маркеры синего цвета для действительной части и зеленого цвета для мнимой части динамической восприимчивости. Пунктирной для случая взаимодействующих частиц и непрерывной для идеальной системы линиями на рисунке показаны аналитические решения для формулы (24). Наблюдается хорошее согласие численных и аналитических результатов в случае отсутствия постоянного поля при малом переменном поле.

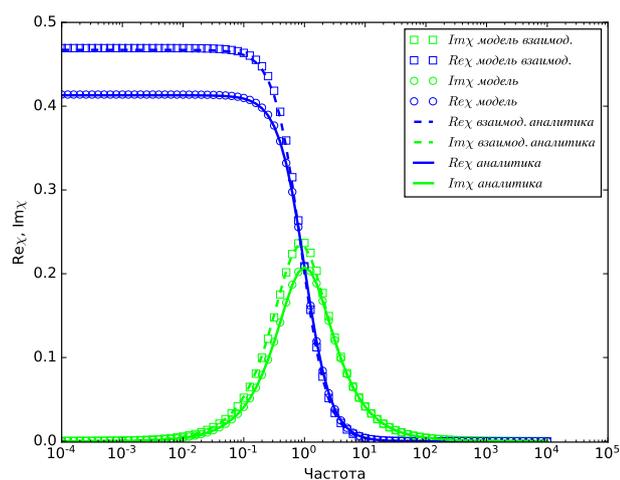
На рисунке 4.3 представлены результаты численного моделирования для системы с  $\chi_L = 0.419$ ,  $\alpha_{ac} = 0.01, 0.1$ ,  $\alpha_{dc} = 1, 2, 5, 8, 10$ . Моделирование было проведено для ансамбля взаимодействующих частиц – не закрашенные квад-



(a)  $\alpha_{ac} = 0.01$ ;  $\alpha_{dc} = 0$ ;  $\chi_L = 0.419$



(b)  $\alpha_{ac} = 0.1$ ;  $\alpha_{dc} = 0$ ;  $\chi_L = 0.419$

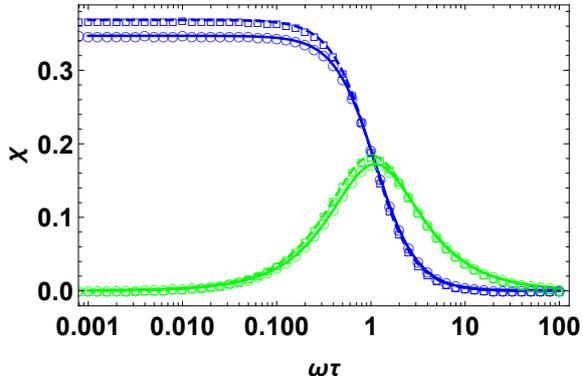


(c)  $\alpha_{ac} = 0.5$ ;  $\alpha_{dc} = 0$ ;  $\chi_L = 0.419$

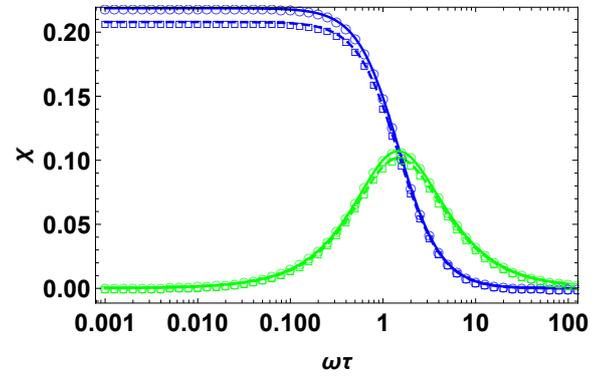
Рисунок 4.2 – Магнитная восприимчивость в зависимости от частоты переменного поля. Сравнение численных результатов с теорией (24)

ратные маркеры синего цвета для действительной части и зеленого цвета для мнимой части динамической восприимчивости, а также идеальной системы – не закрашенные круглые маркеры синего цвета для действительной части и зеленого цвета для мнимой части динамической восприимчивости. Пунктирной линией для случая взаимодействующих частиц и непрерывной для идеальной системы на рисунке показаны аналитические решения для формул (26) и (27). Наблюдается хорошее согласие численных и аналитических результатов в случае  $\alpha_{dc}$  до 5 включительно, для значений  $\alpha_{dc} = 8$  и 10 наблюдается накапливание расхождения для случая взаимодействующих частиц.

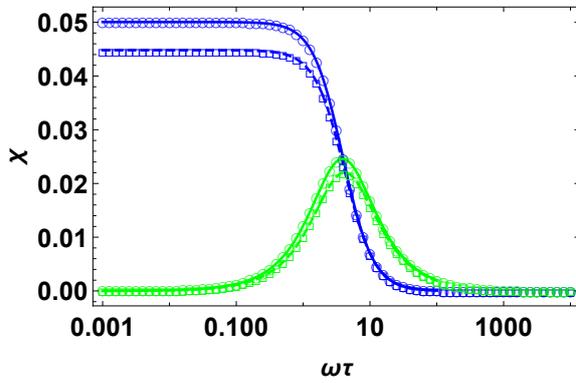
Таким образом, в предельных случаях: отсутствие постоянного поля и малое переменное поле, малая интенсивности постоянного поля с фиксированной амплитудой переменного поля, отсутствующее постоянное поле и переменное поле любой амплитуды, – численные результаты хорошо согласуются с известными аналитическими данными.



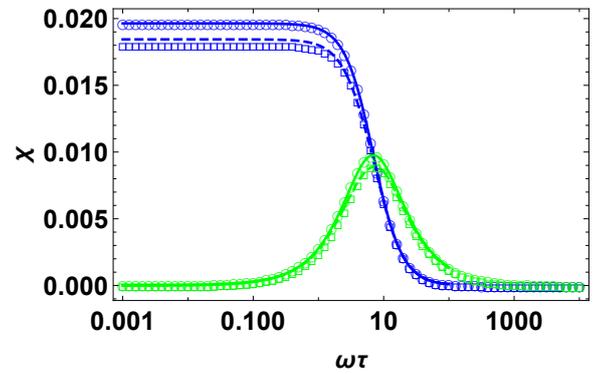
(a)  $\alpha_{ac} = 0.01$ ;  $\alpha_{dc} = 1$ ;  $\chi_L = 0.419$



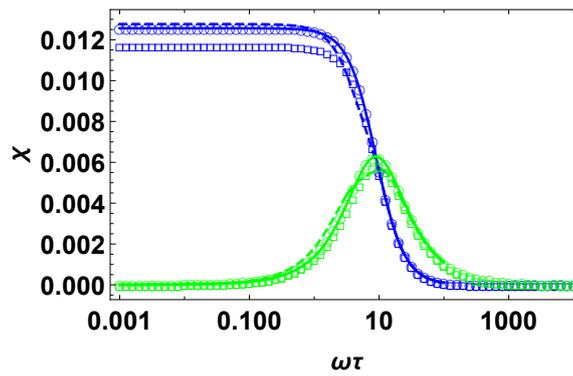
(b)  $\alpha_{ac} = 0.1$ ;  $\alpha_{dc} = 2$ ;  $\chi_L = 0.419$



(c)  $\alpha_{ac} = 0.1$ ;  $\alpha_{dc} = 5$ ;  $\chi_L = 0.419$



(d)  $\alpha_{ac} = 0.1$ ;  $\alpha_{dc} = 8$ ;  $\chi_L = 0.419$



(e)  $\alpha_{ac} = 0.1$ ;  $\alpha_{dc} = 10$ ;  $\chi_L = 0.419$

Рисунок 4.3 – Магнитная восприимчивость в зависимости от частоты переменного поля. Сравнение численных результатов с теорией (26) и (27)

## ГЛАВА 5. ПРЕДСТАВЛЕНИЕ ПОЛУЧЕННЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ

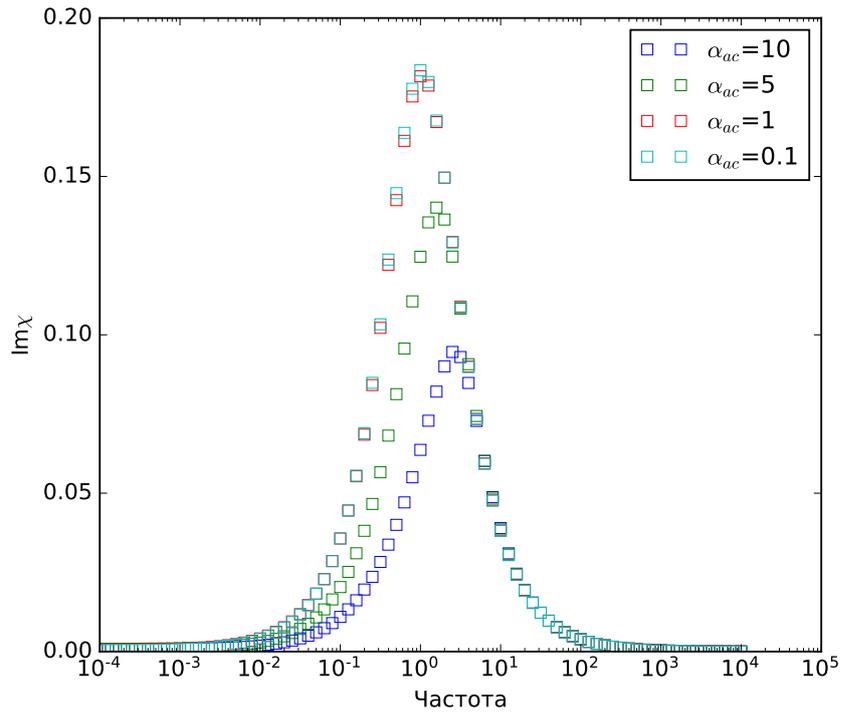
В данной главе представлены графики мнимой и действительной части динамической магнитной восприимчивости. Проведено сравнение для трёх случаев:

1. с фиксированным переменным полем и значением восприимчивости Ланжевена при различных значениях напряженности постоянного магнитного поля;
2. с фиксированным постоянным полем и значением восприимчивости Ланжевена при различной интенсивности переменного поля;
3. с фиксированными переменным и постоянным магнитными полями при различных значениях восприимчивости Ланжевена.

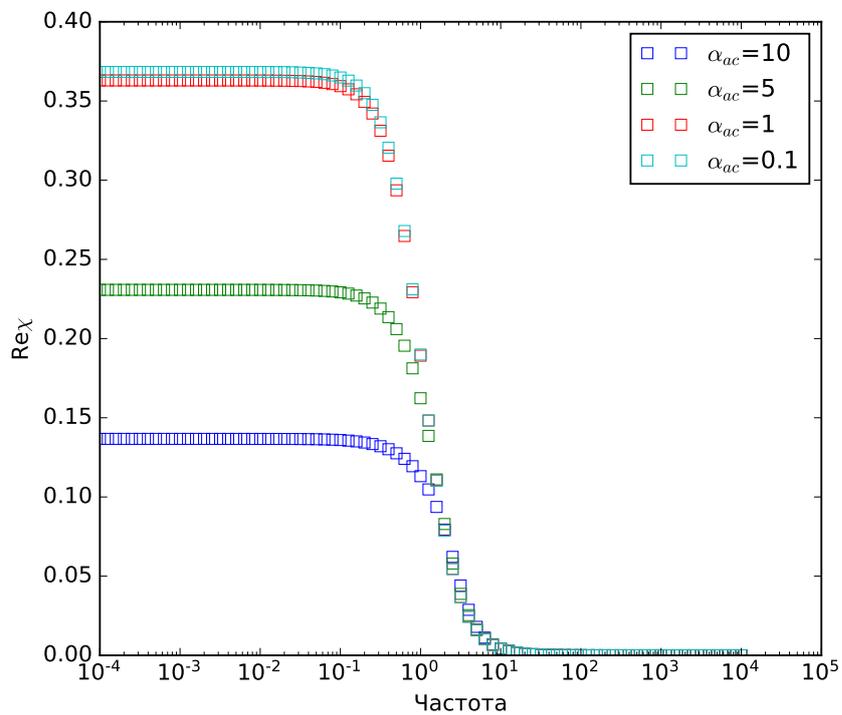
На рисунке 5.1 представлены результаты действительной и мнимой частей, полученные из численных расчетов при  $\alpha_{dc} = 1$ ,  $\chi_L = 0.419$  и  $h_x = 0.01$  при  $\alpha_{ac} = 0.1, 1, 5, 10$ . Видно, что с увеличением амплитуды переменного поля  $\alpha_{ac}$  максимум мнимой части сдвигается вниз, действительная часть также сдвигается вниз.

На рисунке 5.2 представлены результаты действительной и мнимой частей, полученные из численных расчетов при  $\alpha_{ac} = 1$ ,  $\chi_L = 0.419$  и  $h_x = 0.01$  при  $\alpha_{dc} = 0.1, 1, 5, 10$ . Видно, что с увеличением амплитуды переменного поля  $\alpha_{dc}$  максимум мнимой части сдвигается вниз, действительная часть также сдвигается вниз.

На рисунке 5.3 представлены результаты действительной и мнимой частей, полученные из численных расчетов при  $\alpha_{ac} = 1$ ,  $\alpha_{dc} = 1$ , и  $h_x = 0.01$  при  $\chi_L = 0.419, 0.838, 1.26$ . Видно, что с увеличением восприимчивости Ланжевена  $\chi_L$

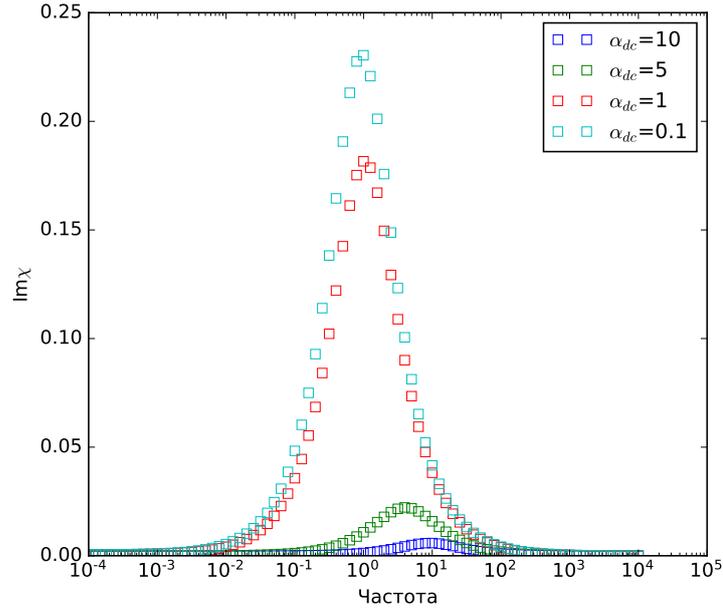


(а) Мнимая часть магнитной восприимчивости

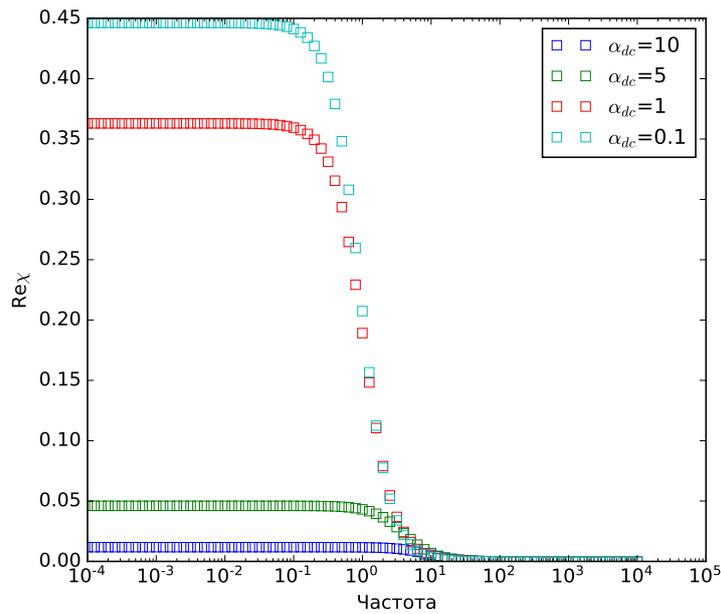


(б) Действительная часть магнитной восприимчивости

Рисунок 5.1 – Магнитная восприимчивость в зависимости от частоты при фиксированных  $\alpha_{dc}$  и  $\chi_L$ , и изменяемых  $\alpha_{ac}$



(a) Мнимая часть  $\chi$

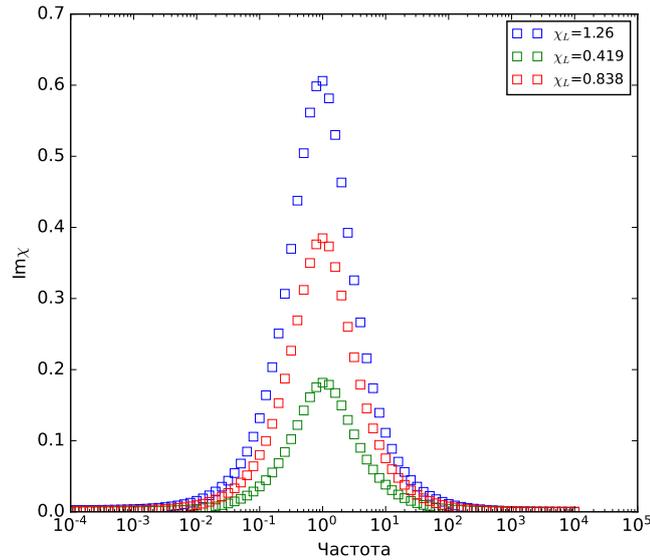


(b) Действительная часть  $\chi$

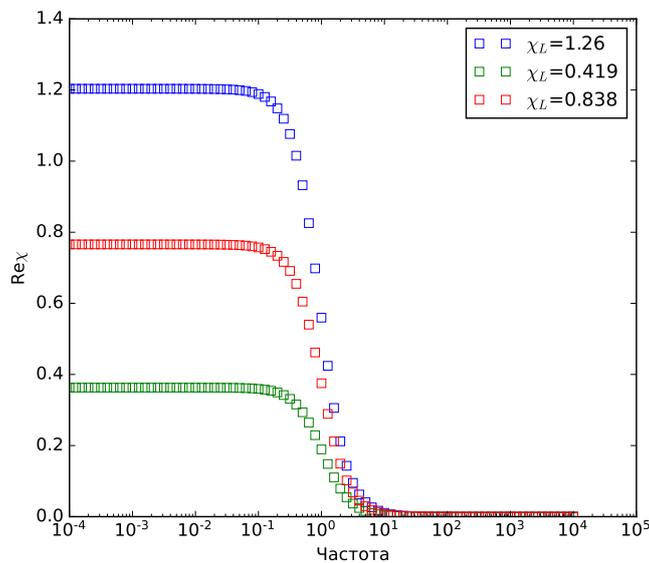
Рисунок 5.2 – Магнитная восприимчивость в зависимости от частоты при фиксированных  $\alpha_{ac}$ ,  $\chi_L$  и изменяемых  $\alpha_{dc}$ .

максимум мнимой части сдвигается вверх, действительная часть также сдвигается вверх.

Таким образом, в работе показано, что повышение интенсивности перемен-



(a) Мнимая часть  $\chi$



(b) Действительная часть  $\chi$

Рисунок 5.3 – Магнитная восприимчивость в зависимости от частоты при фиксированных  $\alpha_{ac}$ ,  $\alpha_{dc}$  и изменяемых  $\chi_L$

ного поля ведет к уменьшению значения магнитной восприимчивости, повышение напряженности постоянного поля ведет к уменьшению мнимой и действительной частей восприимчивости, а увеличение восприимчивости Ланжевена ведет к увеличению как мнимой, так и действительной частей магнитной восприимчивости.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной магистерской диссертации было численно решено уравнение Фоккера-Планка, описывающее плотность вероятности ориентации магнитного момента. Определена динамическая восприимчивость феррожидкости, проанализирована ее зависимость от влияния переменного магнитного поля, постоянного магнитного поля, а также значения восприимчивости Ланжевена. Также были полученные численные результаты были протестированы на аналитических данных, где было получено хорошее согласие результатов.

Интенсивность переменного и постоянного поля очень сильно сказываются на динамической восприимчивости. Диполь-дипольные взаимодействия перестают играть важную роль в системе магнитных частиц, когда она находится в сильных магнитных полях.

## СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ И ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Shliomis M.I.* Magnetic fluids // *Soviet Physics - Uspekhi*. — 1974. — Vol. 17, no. 2. — Pp. 153–169.
2. *S.Odenbach.* Colloidal Magnetic Fluids // *Lecture Notes in Physics*. — 2009.
3. *I. Malaescu.* The concept of ferrofluid preheating in the treatment of cancer by magnetic hyperthermia of tissues // *Medical Hypotheses*. — 2018. — Vol. 110.
4. *I.J. Hilger.* In vivo applications of magnetic nanoparticle hyperthermia // *Hyperthermia*. — 2013. — Vol. 29.
5. Magnetic particle hyperthermia: Nanoparticle magnetism and materials development for cancer therapy / R. Hergt, S. Dutz, R. Müller, M. Zeisberger // *Journal of Physics Condensed Matter*. — 2006. — Vol. 18, no. 38. — Pp. 2919–2934.
6. Enhancement of AC-losses of magnetic nanoparticles for heating applications / R. Hergt, R. Hiergeist, M. Zeisberger et al. // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. — 2004. — Vol. 280, no. 2-3. — Pp. 358–368.
7. Maghemite nanoparticles with very high AC-losses for application in RF-magnetic hyperthermia / R. Hergt, R. Hiergeist, I. Hilger et al. // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. — 2004. — Vol. 270, no. 3. — Pp. 345–357.
8. Optimal size of nanoparticles for magnetic hyperthermia: A combined theoretical and experimental study / B. Mehdaoui, A. Meffre, J. Carrey et al. // *Advanced Functional Materials*. — 2011. — Vol. 21, no. 23. — Pp. 4573–4581.

9. Suitability of commercial colloids for magnetic hyperthermia / M. Kallumadil, M. Tada, T. Nakagawa et al. // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. — 2009. — Vol. 321, no. 10. — Pp. 1509–1513.
10. *Lahonian M., Golneshan A.A.* Numerical study of temperature distribution in a spherical tissue in magnetic fluid hyperthermia using lattice Boltzmann method // *IEEE Transactions on Nanobioscience*. — 2011. — Vol. 10, no. 4. — Pp. 262–268.
11. *Ivanov A.O., Zverev V.S., Kantorovich S.S.* Revealing the signature of dipolar interactions in dynamic spectra of polydisperse magnetic nanoparticles // *Soft Matter*. — 2016. — Vol. 12, no. 15. — Pp. 3507–3513.
12. *Afanaseva N.M., Vabishchevich P.N., Vasileva M.V.* Unconditionally stable schemes for convection–diffusion problems // *Izvestiya vuzov. Mathematics*. — 2013. — Vol. 3. — Pp. 3–15.
13. Influence of dipolar interactions on the magnetic susceptibility spectra of ferrofluids / Julien O. Sindt, Philip J. Camp, Sofia S. Kantorovich et al. // *Physical Review E*. — 2016. — Vol. 93, no. 6. — Pp. 1–11.
14. *Rusanov Michael S., Zverev Vladimir S., Elfimova Ekaterina A.* Dynamic magnetic susceptibility of a ferrofluid: The influence of interparticle interactions and ac field amplitude // *Physical Review E*. — 2021. — Vol. 104, no. 4. — Pp. 1–11.
15. Dynamic magnetic response of a ferrofluid in a static uniform magnetic field / Timur M Batrudinov, Yuliya E Nekhoroshkova, Egor I Paramonov et al. // *Physical Review E*. — 2018. — Vol. 052602, no. 98. — Pp. 052602–1–14.

## ПРИЛОЖЕНИЕ

modeling\_fb.cpp

```
1 #include <stdio.h>
2 #include <string>
3 #include <cmath>
4 #include <cstring>
5 #include <vector>
6 #include <iostream>
7
8 const float hx = 0.01f;
9 const float PI = std::atan(1.0f) * 4.f;
10 const float hx_2 = hx * hx;
11 const float hx__2 = hx * 0.5f;
12
13 struct Params
14 {
15     float alp;
16     float XiL;
17     float alp_DC;
18     double ht;
19     double ht__2;
20     int N_Tr;
21     float tau_omega0;
22     float tau_omegaN;
23 };
24
25 float Integrate_Trapeze_M(int finish, double h, double* function)
26 {
27     double sum = 0.f;
28     for (int i = 1; i < finish; i++)
29     {
30         sum += function[i];
31     }
32     return h * ((function[0] + function[finish]) * 0.5f + sum);
```

```

33 }
34
35 float Integrate_Trapeze(int finish, float h, float* function)
36 {
37     float sum = 0.f;
38     for (int i = 1; i < finish; i++)
39     {
40         sum += function[i];
41     }
42     return h * ((function[0] + function[finish]) + sum);
43 }
44
45 float K(float x)
46 {
47     return 1.f - x * x;
48 }
49
50 float V(Params param, float x, float t, float MST, float r)
51 {
52     return ( param.alp_DC + param.alp * cos(r * (t - param.ht__2)) + MST) * K(x);
53 }
54
55 float A(Params param, float exp_delta_ht, float x, float t, float MST, float r)
56 {
57     float x__h = x - hx__2;
58     return exp_delta_ht * param.ht * (-K(x__h) - hx__2 * V(param, x__h, t, MST, r));
59 }
60
61 float C(Params param, float delta, float exp_delta_ht, float x, float t, float
        MST, float r)
62 {
63     float x__h = x - hx__2;
64     float x_h = x + hx__2;
65     return exp_delta_ht * (hx_2 * (1.f + delta * param.ht) + param.ht * (K(x_h) +
        K(x__h) + hx__2 * V(param, x_h, t, MST, r) - hx__2 * V(param, x__h, t, MST,
        r)));

```

```

66 }
67
68 float B(Params param, float exp_delta_ht, float x, float t, float MST, float r)
69 {
70     float x_h = x + hx__2;
71     return exp_delta_ht * param.ht * (-K(x_h) + hx__2 * V(param, x_h, t, MST, r));
72 }
73
74 float F(float W_i)
75 {
76     return hx_2 * W_i;
77 }
78
79 void M_calc(int k, int N, float* x, float* W, double* M)
80 {
81     float* W_on_x = new float[N + 1];
82     for (int i = 0; i <= N; i++)
83     {
84         W_on_x[i] = W[i] * x[i];
85     }
86     M[k] = Integrate_Trapeze(N, hx, W_on_x);
87     delete [] W_on_x;
88 }
89
90 void W_normirovka(int N, float* W)
91 {
92     float inv_norm = (1.f / (Integrate_Trapeze(N, hx, W)));
93     for (int i = 0; i <= N; i++)
94     {
95         W[i] = inv_norm * W[i];
96     }
97 }
98
99 void Wprev_equal_Wcurr(int N, float* Wprev, float* Wcurr)
100 {
101     for (int i = 0; i <= N; i++)

```

```

102  {
103      Wprev[i] = Wcurr[i];
104  }
105  }
106
107  float W0(Params params, float x)
108  {
109      return exp(params.alp_DC * x);
110  }
111
112  float C_const(Params params, int N, float* x)
113  {
114      float* W0_on_x = new float[N + 1];
115      float* W0_ = new float[N + 1];
116      for (int i = 0; i <= N; i++)
117      {
118          W0_[i] = W0(params, x[i]);
119          W0_on_x[i] = W0_[i] * x[i];
120      }
121      return (params.XiL * Integrate_Trapeze(N, hx, W0_on_x) / Integrate_Trapeze(N,
122          hx, W0_));
123
124  float W_start(Params params, float x, float r)
125  {
126      return exp(params.alp_DC * x) + params.alp * x / (1 + pow(r / 2, 2));
127  }
128
129  float W_start_(Params params, float constanta, float x, float r)
130  {
131      return exp((params.alp_DC + constanta) * x) + params.alp * x / (1 + pow(r / 2,
132          2));
133
134  void Progonka(int N, float* A, float* B, float* C, float* F, float* result)
135  {

```

```

136 float* alpha = new float[N + 1];
137 float* beta = new float[N + 1];
138 float inv_denom;
139 alpha[1] = -C[0] / B[0];
140 beta[1] = F[0] / B[0];
141 for (int i = 1; i < N; i++)
142 {
143     inv_denom = 1.0f / (A[i] * alpha[i] + B[i]);
144     alpha[i + 1] = -C[i] * inv_denom;
145     beta[i + 1] = (F[i] - A[i] * beta[i]) * inv_denom;
146 }
147 result[N] = (F[N] - A[N] * beta[N]) / (B[N] + A[N] * alpha[N]);
148 for (int i = N - 1; i >= 0; i--)
149 {
150     result[i] = alpha[i + 1] * result[i + 1] + beta[i + 1];
151 }
152 delete[] alpha;
153 delete[] beta;
154 }
155
156 void find_last_W_and_M(Params params, float exp_delta_ht, float delta, int N,
157 float* x, double* t, float* mst,
158 float* Wprev, float r, float* Wcurr, double* M, bool flag)
159 {
160 float* A_values = new float[N + 1];
161 float* B_values = new float[N + 1];
162 float* C_values = new float[N + 1];
163 float* F_values = new float[N + 1];
164
165 for (int i = 0; i <= N; i++)
166 {
167     A_values[i] = B_values[i] = C_values[i] = F_values[i] = 0;
168 }
169 if (flag)
170     M_calc(0, N, x, Wprev, M);
171

```

```

172 for (int k = 1; k <= params.N_Tr; k++)
173 {
174
175     int i = 0;
176     B_values[i] = C(params, delta, exp_delta_ht, x[i], t[k], mst[k], r);
177     C_values[i] = B(params, exp_delta_ht, x[i], t[k], mst[k], r);
178     F_values[i] = F(Wprev[i]);
179
180     for (i = 1; i <= N - 1; i++)
181     {
182         A_values[i] = A(params, exp_delta_ht, x[i], t[k], mst[k], r);
183         B_values[i] = C(params, delta, exp_delta_ht, x[i], t[k], mst[k], r);
184         C_values[i] = B(params, exp_delta_ht, x[i], t[k], mst[k], r);
185         F_values[i] = F(Wprev[i]);
186     }
187
188     i = N;
189     A_values[i] = A(params, exp_delta_ht, x[i], t[k], mst[k], r);
190     B_values[i] = C(params, delta, exp_delta_ht, x[i], t[k], mst[k], r);
191     F_values[i] = F(Wprev[i]);
192
193     Progonka(N, A_values, B_values, C_values, F_values, Wcurr);
194
195     W_normirovka(N, Wcurr);
196     Wprev_equal_Wcurr(N, Wprev, Wcurr);
197
198     if (flag)
199         M_calc(k, N, x, Wprev, M);
200 }
201 delete [] A_values;
202 delete [] B_values;
203 delete [] C_values;
204 delete [] F_values;
205 };
206
207 void Xi_calc(Params params)

```

```

208 {
209     float XiL_3_PI_alp = (3.f * params.XiL) / (PI * params.alp);
210
211     float delta = 2 * params.alp + 2 * params.alp_DC;
212     float delta_XiL = 2 * params.alp + 2 * params.alp_DC + params.XiL;
213
214     const int N = int(2.f / hx) - 1;
215     float* x = new float[N + 1];
216
217     for (int i = 0; i <= N; i++)
218     {
219         x[i] = -1.0f + (0.5f + i) * hx;
220     }
221
222     int deg_num = int(10 * std::log10(params.tau_omegaN / params.tau_omega0)) + 1;
223     float d[deg_num];
224     float r[deg_num];
225     float r_2[deg_num];
226     r_2[0] = params.tau_omega0;
227     r[0] = 2.f * r_2[0];
228     d[0] = std::log10(r[0]);
229     for (int i = 1; i < deg_num; i++)
230     {
231         d[i] = d[0] + 0.1f * i;
232         r[i] = pow(10.f, d[i]);
233         r_2[i] = r[i] * 0.5f;
234     }
235
236     char buf[100];
237     int res = snprintf(buf, sizeof(buf),
238         "REXi_interaction.txt");
239     FILE* Re_Xi_file_interaction;
240     Re_Xi_file_interaction = fopen(buf, "w");
241
242     res = snprintf(buf, sizeof(buf),
243         "REXi_without_interaction.txt");

```

```

244 FILE* Re_Xi_file_without_interaction;
245 Re_Xi_file_without_interaction = fopen(buf, "w");
246
247 res = snprintf(buf, sizeof(buf),
248     "IMXi_interaction.txt");
249 FILE* Im_Xi_file_interaction;
250 Im_Xi_file_interaction = fopen(buf, "w");
251
252 res = snprintf(buf, sizeof(buf),
253     "IMXi_without_interaction.txt");
254 FILE* Im_Xi_file_without_interaction;
255 Im_Xi_file_without_interaction = fopen(buf, "w");
256
257 float* Wprev = new float[N + 1];
258 float* Wprev_ = new float[N + 1];
259 float* Wcurr = new float[N + 1];
260 float* Wcurr_ = new float[N + 1];
261 printf("tauomega\tht\n");
262 for (int s = 0; s < deg_num; s++)
263     // int s = 1;
264 {
265     double Tr = 2.f * PI / r[s];
266
267     params.ht = Tr / params.N_Tr;
268     printf("%f\tht\n", r_2[s], params.ht);
269     params.ht__2 = params.ht * 0.5f;
270     float exp_delta_ht = exp(-delta * params.ht__2);
271     float exp_delta_ht_XiL = exp(-delta_XiL * params.ht__2);
272
273
274     double* t = new double[params.N_Tr + 1];
275     t[0] = 0.0;
276     for (int m = 1; m <= params.N_Tr; m++)
277     {
278         t[m] = t[m - 1] + params.ht;
279     }

```

```

280 double* M = new double[params.N_Tr + 1];
281 float* mst = new float[params.N_Tr + 1];
282 double* M_on_sin_rt = new double[params.N_Tr + 1];
283 double* M_on_cos_rt = new double[params.N_Tr + 1];
284
285 for (int i = 0; i <= params.N_Tr; i++)
286 {
287     mst[i] = 0.0f;
288 }
289
290 for (int i = 0; i <= N; i++)
291 {
292     Wprev[i] = W_start(params, x[i], r[s]);
293 }
294 W_normirovka(N, Wprev);
295
296 find_last_W_and_M(params, exp_delta_ht, delta, N, x, t, mst, Wprev, r[s],
297     Wcurr, M, 0);
298
299 Wprev_equal_Wcurr(N, Wprev, Wcurr);
300
301 find_last_W_and_M(params, exp_delta_ht, delta, N, x, t, mst, Wprev, r[s],
302     Wcurr, M, 1);
303
304 for (int k = 0; k <= params.N_Tr; k++)
305 {
306     float rt = r[s] * t[k];
307     M_on_sin_rt[k] = M[k] * sin(rt);
308     M_on_cos_rt[k] = M[k] * cos(rt);
309 }
310
311 float im_chi = r[s] * XiL_3_PI_alp * Integrate_Trapeze_M(params.N_Tr,
312     params.ht, M_on_sin_rt);
313
314 fprintf(Im_Xi_file_without_interaction, "%f %f\n", r_2[s], im_chi);
315
316 float re_chi = r[s] * XiL_3_PI_alp * Integrate_Trapeze_M(params.N_Tr,

```

```

    params.ht, M_on_cos_rt);
313 fprintf(Re_Xi_file_without_interaction, "%f %f\n", r_2[s], re_chi);
314
315 for (int k = 0; k <= params.N_Tr; k++)
316 {
317     mst[k] = params.XiL * M[k];
318 }
319 float constanta = C_const(params, N, x);
320 for (int i = 0; i <= N; i++)
321 {
322     Wprev_[i] = W_start_(params, constanta, x[i], r[s]);
323 }
324 W_normirovka(N, Wprev_);
325
326 find_last_W_and_M(params, exp_delta_ht_XiL, delta_XiL, N, x, t, mst, Wprev_,
    r[s], Wcurr_, M, 0);
327
328 Wprev_equal_Wcurr(N, Wprev_, Wcurr_);
329
330 find_last_W_and_M(params, exp_delta_ht_XiL, delta_XiL, N, x, t, mst, Wprev_,
    r[s], Wcurr_, M, 1);
331
332 for (int i = 0; i <= params.N_Tr; i++)
333 {
334     float rt = r[s] * t[i];
335     M_on_sin_rt[i] = M[i] * sin(rt);
336     M_on_cos_rt[i] = M[i] * cos(rt);
337 }
338
339 im_chi = r[s] * XiL_3_PI_alp * Integrate_Trapeze_M(params.N_Tr, params.ht,
    M_on_sin_rt);
340 fprintf(Im_Xi_file_interaction, "%f %f\n", r_2[s], im_chi);
341
342 re_chi = r[s] * XiL_3_PI_alp * Integrate_Trapeze_M(params.N_Tr, params.ht,
    M_on_cos_rt);
343 fprintf(Re_Xi_file_interaction, "%f %f\n", r_2[s], re_chi);

```

```

344
345     delete [] M;
346     delete [] mst;
347     delete [] M_on_sin_rt;
348     delete [] M_on_cos_rt;
349     delete [] t;
350 }
351
352 printf("Calculation is finished. Files saved in current folder.\n");
353
354 fclose(Re_Xi_file_interaction);
355 fclose(Re_Xi_file_without_interaction);
356 fclose(Im_Xi_file_interaction);
357 fclose(Im_Xi_file_without_interaction);
358
359 delete [] x;
360
361 delete [] Wprev;
362 delete [] Wprev_;
363 delete [] Wcurr;
364 delete [] Wcurr_;
365 }
366
367 int main(int argc, char* argv[])
368 {
369     Params params;
370
371     params.alp = 0.01;
372     params.alp_DC = 1;
373     params.XiL = 0.419;
374     params.N_Tr = 10000;
375
376     Xi_calc(params);
377
378     return 0;
379 }

```