

**МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
СУМСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ УНІВЕРСИТЕТ**

Кафедра прикладної математики та моделювання складних систем

Допущено до захисту
Завідувач кафедри ПМ та МСС
_____ Коплик І.В.
(підпис)
« ____ » _____ 2022р.

КВАЛІФІКАЦІЙНА РОБОТА
на здобуття освітнього ступеня «магістр»

спеціальність 113 «Прикладна математика»
освітньо-професійна програма «Наука про дані та моделювання складних систем»

тема роботи «**ЧИСЕЛЬНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ДИНАМІКИ
ЗВАЖЕНИХ ФЕРОМАГНІТНИХ НАНОЧАСТИНОК В
ЗОВНІШНІХ МАГНІТНИХ ПОЛЯХ**»

Виконавець

студент факультету ЕЛІТ

Лютий Антон Тарасович

(прізвище, ім'я, по батькові)

_____ (підпис)

Науковий керівник

канд.фіз.-мат.наук

(науковий ступінь, вчене звання)

Дворниченко Аліна Василівна

(прізвище, ім'я, по батькові)

_____ (підпис)

Суми – 2022

СУМСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ УНІВЕРСИТЕТ

Факультет **електроніки та інформаційних технологій**
Кафедра **прикладної математики та моделювання складних систем**

Рівень вищої освіти Другий (магістр)
(перший (бакалавр) або другий (магістр))

Галузь знань **11 Математика та статистика**
Спеціальність **113 Прикладна математика**

Освітня програма **освітньо-професійна** «Наука про дані та моделювання складних систем»

ЗАТВЕРДЖУЮ
Завідувач кафедри ПМ та МСС
Коплик І.В. _____
«__» _____ 2022р.

ЗАВДАННЯ НА КВАЛІФІКАЦІЙНУ РОБОТУ ЗДОБУВАЧУ ВИЩОЇ ОСВІТИ

Лютий Антон Тарасович

(прізвище, ім'я, по батькові)

1. Тема роботи Чисельне моделювання динаміки зважених феромагнітних наночастинок в зовнішніх магнітних полях

Керівник роботи Дворниченко Аліна Василівна

канд.фіз.-мат.наук, доцент, старший викладач кафедри ПМ та МСС

(прізвище, ім'я, по батькові, науковий ступінь, вчене звання, посада)

затверджено наказом факультету ЕлІТ від «24» жовтня 2022 р. № 0933-VI

2. Термін подання роботи студентом «17» грудня 2022р.

3. Вихідні дані до роботи Феромагнітні наночастинки, ефект спрямованого транспорту, метод Рунге-Кутта 4 порядку, інтерполяція кубічним сплайном, елементи асимптотичної теорії спрямованого транспорту наночастинок.

4. Зміст розрахунково-пояснювальної записки (перелік питань, що їх належить розробити) Вступ. Аналітичний огляд. Методика досліджень.

Реалізація комп'ютерного експерименту. Висновки. Перелік використаних джерел. Додатки.

5. Перелік графічного матеріалу Ілюстрації результатів комп'ютерного експерименту, таблиця.

6. Консультанти до проекту (роботи), із значенням розділів проекту, що стосується їх

Розділ	Прізвище, ініціали та посада консультанта	Підпис, дата	
		Завдання видав	Завдання прийняв

7. Дата видачі завдання «17» жовтня 2022р.

КАЛЕНДАРНИЙ ПЛАН

№ п/п	Назва етапів кваліфікаційної роботи	Термін виконання роботи	Примітка
1	Дослідження спрямованого транспорту (дрейфового руху) наночастинки	17.10–31.10.2022	Виконано
2	Написання програми для знаходження чисельного розв'язку системи диференційних рівнянь першого порядку за допомогою методу Рунге – Кутти 4 порядку	01.11–06.11.2022	Виконано
3	Визначення з вхідними даними та одержання чисельного розв'язку системи	07.11–10.11.2022	Виконано
4	Розробка програми, що дозволяє прогнозувати рух частинки при зміні кута між магнітними полями за допомогою попередньо встановленої залежності для швидкості	11.11–23.11.2022	Виконано
5	Розробка елементів асимптотичної теорії спрямованого транспорту феромагнітних наночастинок	24.11–10.12.2022	Виконано
6	Написання висновків по отриманим результатам та оформлення кваліфікаційної роботи	11.12–17.12.2022	Виконано

Здобувач вищої освіти

Лютий А.Т.

Керівник роботи

Дворниченко А.В.

РЕФЕРАТ

Кваліфікаційна робота: 44 с., 18 рисунків, 1 таблиця, 27 джерел.

Мета роботи: дослідити явище спрямованого транспорту (дрейфу) наночастинок, що з'являється у в'язкій рідині під одночасною дією періодичного у часі градієнтного і постійного у часі і просторі магнітних полів.

Об'єкт дослідження: спрямований транспорт (дрейф) однодомених феромагнітних наночастинок у в'язкій рідині.

Предмет дослідження: система диференціальних рівнянь першого порядку для кута намагніченості і координати центру наночастинок, що описують її обертальний і трансляційний рухи.

Методи навчання: рівняння математичної фізики, чисельні методи, моделювання поведінки однодомених наночастинок, засоби програмування мовою Python.

Ключові слова: ефект спрямованого транспорту, явний метод Рунге – Кутти 4 порядку, кубічний сплайн, елементи асимптотичної теорії, Python.

ЗМІСТ

ВСТУП.....	5
1 АНАЛІТИЧНИЙ ОГЛЯД	6
1.1 Однодоменні наночастинки: Використання та транспортні властивості	6
1.2 Методи реалізації спрямованого транспорту наночастинок	6
1.3 Динаміка наночастинок у градієнтному магнітному полі, що змінюється з часом за гармонічним законом	7
1.3.1 Динаміка наночастинок при $v_g = 0$	10
1.3.2 Динаміка наночастинок при $v_g \neq 0$ і $v_{\perp} = v_{\parallel} = 0$	11
1.3.3 Динаміка наночастинок при $v_g \neq 0$, $v_{\perp} \neq 0$ і $v_{\parallel} = 0$	12
2 МЕТОДИКА ДОСЛІДЖЕНЬ	15
2.1 Явний метод Рунге – Кутти 4 порядку	15
2.2 Інтерполяція сплайнами	16
3 РЕАЛІЗАЦІЯ КОМП'ЮТЕРНОГО ЕКСПЕРИМЕНТУ	18
3.1 Вибір початкових умов для розрахунків	18
3.2 Отримання чисельного розв'язку системи	19
3.2.1 Чисельний розв'язок системи при наборі вхідних даних 1	19
3.2.2 Чисельний розв'язок системи при наборі вхідних даних 2	21
3.3 Дослідження залежності між початковою середньою швидкістю наночастинки та кутом між однорідним та градієнтним магнітними полями	23
3.4 Прогнозування руху наночастинки при зміні куту між магнітними полями	25

3.4.1 Чисельні розв'язки системи при наборі вхідних даних 2 і зміні куту між магнітними полями.....	25
3.4.2 Знаходження відношення максимальної початкової швидкості до початкової швидкості при певному значенні кута між магнітними полями	26
3.4.3 Інтерполяція прогнозованого руху частинки.....	27
3.5 Елементи асимптотичної теорії спрямованого транспорту наночастинок	30
3.5.1 Динаміка наночастинок в околі початку координат	30
3.5.2 Динаміка наночастинок далеко від початку координат	32
3.5.3 Узгоджений асимптотичний аналіз.....	33
ВИСНОВКИ.....	36
ПЕРЕЛІК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ.....	37
ДОДАТОК А	39
ДОДАТОК Б	40
ДОДАТОК В	42
ДОДАТОК Г	43
ДОДАТОК Ґ.....	44

ВСТУП

Під час моделювання поведінки однодомених наночастинок було отримано ефект спрямованого транспорту (дрейфовий рух), якщо на частинку водночас діють постійне однорідне магнітне поле та градієнтне магнітне поле. При цьому отримання чисельного розв'язку досить часто викликає ряд проблем, пов'язаних із занадто великою кількістю витраченого часу, або недостатньою потужністю обчислювальних пристроїв. Особливо помітними проблемами стають при необхідності многократних повторних обчислень. Тому, метою даної кваліфікаційної роботи було оптимізувати процес моделювання поведінки наночастинок шляхом знаходження аналітичного розв'язку на основі отриманого чисельного розв'язку.

На першому етапі відбувалося дослідження системи, що описує поведінку наночастинок в постійному однорідному та градієнтному магнітних полях. Була розроблена чисельна процедура для розв'язання системи рівнянь, проведений аналіз їх розв'язку на великих часових інтервалах, коли рівняння стають жорсткими.

Другим етапом було дослідження швидкості наночастинок та встановлення залежності між середньою швидкістю наночастинок та кутом між напрямками постійного однорідного та градієнтного магнітних полів.

Третім етапом роботи стала розробка програми, що дозволяє прогнозувати рух частинки при зміні кута між магнітними полями за допомогою попередньо встановленої залежності для швидкості.

Фінальним етапом кваліфікаційної роботи була задача розробити елементи асимптотичної теорії спрямованого транспорту феромагнітних наночастинок.

1 АНАЛІТИЧНИЙ ОГЛЯД

1.1 Однодоменні наночастинки: Використання та транспортні властивості

Феромагнітні наночастинки в однодоменному стані широко використовуються в біомедичних дослідженнях [1], у тому числі в магнітній гіпертермії [2,3], магнітній сепарації клітин [4,5] і магнітній доставці ліків [6,7]. Зазвичай, ці застосування базуються на особливостях магнітної і механічної динаміки наночастинок. Якщо поле магнітної анізотропії суттєво перевищує всі зовнішні магнітні поля, тоді вектор намагніченості наночастинки приблизно може розглядатися як ‘вморожений’ в її тіло. В цій так званій моделі жорсткого диполя [8] динаміка вектору намагніченості повністю визначається трансляційним та обертальним рухами наночастинки і, як наслідок, динаміку намагніченості можна взагалі виключити з розгляду. Цей факт суттєво спрощує теоретичний аналіз динаміки наночастинок у в'язкій рідині, а в деяких найпростіших випадках (коли, наприклад, їх гідродинамічною та магнітною взаємодіями можна знехтувати) дозволяє отримати аналітичні результати. У подальшому основна увага буде приділена вивченню транспортних властивостей однодоменних наночастинок, важливих з точки зору сепарації наночастинок і доставки ліків до уражених органів.

1.2 Методи реалізації спрямованого транспорту наночастинок

Одним з найбільш загальних методів генерації транспортного руху однодоменних наночастинок є використання постійних у часі градієнтних магнітних полів. Такі поля породжують сили та моменти сил, що діють на наночастинки, і які внаслідок трансляційного та обертального рухів залежать від часу. Аналіз системи рівнянь руху для кута вектору намагніченості і координати центра наночастинки показав [9], що сумісна трансляційна і обертальна динаміка наночастинок є досить складною і, як з'ясувалося чисельно, існує чотири режими спрямованого транспорту наночастинок.

Було також показано, що сила Магнуса, яка діє на наночастинки, що нерівномірно обертаються у в'язкій рідині, може спричиняти їх спрямований транспорт. Це явище, вперше досліджене в роботах [10-12], дозволяє керувати як напрямком, так і величиною середньої швидкості наночастинок. Разом з тим, внаслідок нанорозмірів частинок, ефект транспорту, що спричиняється силою Магнуса, є досить малим. Тому залишається актуальною проблема пошуку та реалізація нових фізичних принципів, що спричиняють спрямований транспорт наночастинок. У цьому контексті особливий інтерес представляють методи, що використовують магнітні поля, у тому числі періодичні у часі. Використання таких полів може бути корисним і з точки зору застосувань феромагнітних наночастинок в магнітній гіпертермії, оскільки змінні магнітні поля створюють додаткові канали дисипації енергії.

1.3 Динаміка наночастинок у градієнтному магнітному полі, що змінюється з часом за гармонічним законом

В подальшому основна увага буде приділена вивченню динаміки сферичних невзаємодіючих наночастинок радіуса a в рамках моделі жорстких диполів. Будемо вважати, що градієнтне магнітне поле $\mathbf{H}_g = \mathbf{H}_g(x, t)$, яке змінюється з часом за гармонічним законом, задається формулою

$$\mathbf{H}_g = gx \sin(\Omega t + \phi) \mathbf{e}_x, \quad (1.1)$$

а незалежне від часу зовнішнє однорідне магнітне поле \mathbf{H} має лише дві компоненти

$$\mathbf{H} = H_{\parallel} \mathbf{e}_x + H_{\perp} \mathbf{e}_y. \quad (1.2)$$

Тут $g (\geq 0)$ – це градієнт магнітного поля (1.1), Ω – його частота, $\phi \in [0, \pi]$ – початкова фаза, H_{\parallel} і $H_{\perp} (\geq 0)$ – паралельна і перпендикулярна (до градієнтного поля) компоненти однорідного поля (1.2), $H = \sqrt{H_{\parallel}^2 + H_{\perp}^2}$ – величина вектору

зовнішнього магнітного поля, а $\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z$ – одиничні вектори вздовж відповідних осей декартової системи координат.

Ми припускаємо, що наночастинки однодоменні, а поле їх магнітної анізотропії настільки велике, що вектор намагніченості $\mathbf{M} = \mathbf{M}(t)$ ($|\mathbf{M}| = M = \text{const}$) може розглядатися в замороженим в тіло кожної наночастинки. Ця так звана модель жорстких диполів широко використовується, наприклад, для вивчення ролі магнітної диполь-дипольної взаємодії і теплових флуктуацій в динаміці зважених наночастинок [13-17]. Якщо їх розміри досить великі ($a \gtrsim 50 \text{ nm}$), тоді тепловими флуктуаціями напрямків намагніченості можна знехтувати і її динаміку можна розглядати в детерміністичному наближенні. В цьому випадку, приймаючи, що початкова намагніченість $\mathbf{M}_0 = \mathbf{M}(0)$ лежить в площині xu , вектор намагніченості \mathbf{M} можна представити у вигляді

$$\mathbf{M} = M(\cos \varphi \mathbf{e}_x + \sin \varphi \mathbf{e}_y), \quad (1.3)$$

де $\varphi = \varphi(t)$ – кут намагніченості (тобто кут між векторами \mathbf{e}_x і \mathbf{M}). Вводячи кутову швидкість наночастинки $\boldsymbol{\omega} = \boldsymbol{\omega}(t)$, можна переконатися, що в моделі жорстких диполів кінематичне рівняння має вигляд

$$\frac{d}{dt} \mathbf{M} = \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{M} \quad (1.4)$$

(знак \times позначає векторний добуток). Із (1.3) і (1.4) знаходимо $\boldsymbol{\omega} = \omega_z \mathbf{e}_z$, тобто наночастинки обертаються навколо осі z і $\omega_z = d\varphi/dt$.

Далі, нехтуючи інерційними ефектами і припускаючи, що обертальне та трансляційне числа Рейнольдса малі [18], із рівнянь балансу моментів і сил відповідно отримуємо

$$\frac{d\varphi}{dt} = \frac{MV}{6\eta} [H_{\perp} \cos \varphi - H_{\parallel} \sin \varphi - gR_x \sin \varphi \sin(\Omega t + \phi)] \quad (1.5)$$

(η – в'язкість рідини, $V = (4/3)\pi a^3$ – об'єм наночастинки) і

$$\frac{dR_x}{dt} = \frac{2Mga^2}{9\eta} \cos \varphi \sin(\Omega t + \phi) \quad (1.6)$$

($R_x = R_x(t)$ – x -координата центру частинки). Нарешті, вводячи безрозмірний час $\tau = \Omega t$, безрозмірну координату частинки $r_x = r_x(\tau) = R_x/a$ і безрозмірні характеристичні частоти

$$v_g = \frac{Mga}{6\eta\Omega}, \quad v_{\perp} = \frac{MH_{\perp}}{6\eta\Omega}, \quad v_{\parallel} = \frac{MH_{\parallel}}{6\eta\Omega}, \quad (1.7)$$

рівняння (1.5) і (1.6) можуть бути зведені до системи двох диференціальних рівнянь першого порядку для φ та r_x [19]

$$\dot{\varphi} = v_{\perp} \cos \varphi - v_{\parallel} \sin \varphi - v_g r_x \sin \varphi \sin(\tau + \phi), \quad (1.8)$$

$$\dot{r}_x = (4/3)v_g \cos \varphi \sin(\tau + \phi), \quad (1.9)$$

де точка зверху позначає похідну відносно безрозмірного часу τ . Незважаючи на досить простий вид цих рівнянь, їх розв'язок досить складно отримати не тільки аналітично, а й чисельно. Причина полягає у тому, що рівняння (1.8) і (1.9) належать до класу так званих жорстких рівнянь [20], тобто коли певні чисельні методи, що використовуються для їх розв'язку, стають з часом чисельно нестабільними (тому що $|r_x(\tau)|$ необмежено зростає, а $\varphi(\tau)$ наближається до ступеневої функції при $\tau \rightarrow \infty$, дивись нижче).

Рівняння (1.8) і (1.9), доповнені початковими умовами

$$\varphi(0) = \varphi_0 \in [0, \pi], \quad r_{x0} = r_x(0) \in (-\infty, \infty), \quad (1.10)$$

описують зв'язані обертальні та трансляційні рухи наночастинок у в'язкій рідині, що знаходиться під одночасною дією періодичного у часі градієнтного магнітного поля і постійного однорідного магнітного поля. Перед тим, як перейти до аналізу за допомогою рівнянь (1.8) і (1.9) спрямованого транспорту наночастинок при $v_g \neq 0$, $v_{\perp} \neq 0$ і $v_{\parallel} \neq 0$, розглянемо окремі випадки, вивчені автором даної магістерської роботи.

1.3.1 Динаміка наночастинок при $v_g = 0$

В цьому найбільш простому випадку рівняння (1.8) можна легко розв'язати. Якщо $\varphi_0 \equiv \varphi(0) \geq \varphi_\infty \equiv \varphi(\infty)$, тоді рівняння (1.8) дає [21]

$$\varphi = \varphi_\infty + \arccos \frac{\cos(\varphi_0 - \varphi_\infty) + \tanh[(v_\perp^2 + v_\parallel^2)^{1/2} \tau]}{1 + \cos(\varphi_0 - \varphi_\infty) \tanh[(v_\perp^2 + v_\parallel^2)^{1/2} \tau]} \quad (1.11)$$

при $\varphi(0) > \varphi_\infty = \varphi(\infty)$ і

$$\varphi = \varphi_\infty - \arccos \frac{\cos(\varphi_0 - \varphi_\infty) + \tanh \left[(v_\perp^2 + v_\parallel^2)^{\frac{1}{2}} \tau \right]}{1 + \cos(\varphi_0 - \varphi_\infty) \tanh \left[(v_\perp^2 + v_\parallel^2)^{\frac{1}{2}} \tau \right]} \quad (1.12)$$

при $\varphi(0) < \varphi_\infty$. В цьому випадку динаміка кута намагніченості має релаксаційний характер (див. Рис. 1.1), а центри частинок залишаються у рівноважному стані.

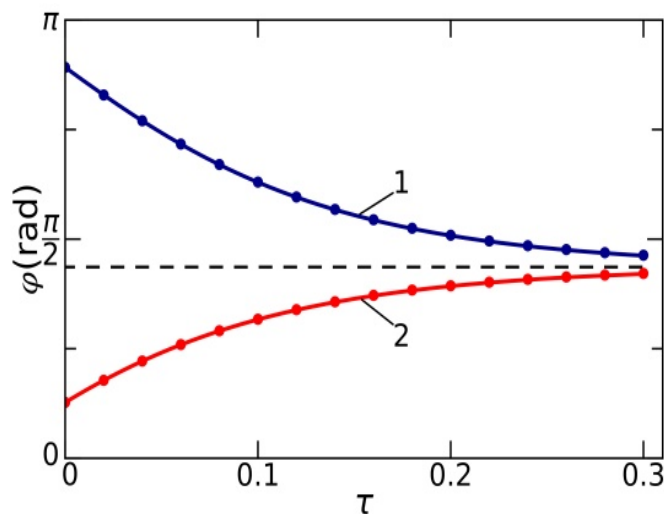


Рис. 1.1. Залежність кута намагніченості φ від безрозмірного часу τ .

Параметри системи для Рис. 1.1: $v_\perp = 10$, $v_\parallel = 2$ (тобто $\varphi_\infty = 1.37$, горизонтальна пунктирна лінія), $\varphi_0 = 2.8$ рад [суцільна лінія 1, формула (1.11)] та $\varphi_0 = 0.4$ рад [суцільна лінія 2, формула (1.12)]. Чисельний розв'язок рівняння (1.8) позначено круглими символами.

1.3.2 Динаміка наночастинок при $v_g \neq 0$ і $v_{\perp} = v_{\parallel} = 0$

В цьому випадку спрямований транспорт (дрейфовий рух) наночастинок відсутній [22]. Цей факт можна довести аналітично, використовуючи рівняння (1.8) і (1.9). Для цього помножимо рівняння (1.8) на $\cos \varphi$, рівняння (1.9) на $\sin \varphi$ і перше розділимо на друге. Приймаючи до уваги, що $dr_x^2/dt = 2r_x \dot{r}_x$ і виконуючи інтегрування отриманого рівняння за часом від 0 до τ , знаходимо

$$r_x^2 = r_{x0}^2 + \frac{8}{3} \ln \frac{\sin \varphi_0}{\sin \varphi}, \quad (1.13)$$

де φ_0 і $\varphi \in (0, \pi)$. Особливістю цього рівняння є те, що воно алгебраїчне, а не диференціальне, тобто $r_x = r_x(\varphi)$. Розділяючи в цьому випадку змінні φ і τ в рівнянні (1.8), отримуємо

$$\int_{\varphi_0}^{\varphi(\tau)} \frac{d\varphi}{r_x(\varphi) \sin \varphi} = -v_g F(\tau), \quad (1.14)$$

де

$$F(\tau) = \cos \phi - \cos(\tau + \phi). \quad (1.15)$$

Звідси ясно видно, що кут φ є періодичною функцією часу: $\varphi(\tau) = \varphi(\tau + 2\pi n)$ ($n = 1, 2, \dots$).

Так само, переписавши рівняння (1.13) у вигляді

$$\sin \varphi = \sin \varphi_0 \exp[-3(r_x^2 - r_{x0}^2)/8], \quad (1.16)$$

переконаємося, що $\varphi = \varphi(r_x)$. Тому, розділяючи змінні r_x і τ , із рівняння (1.9) отримуємо

$$\int_{r_{x0}}^{r_x(\tau)} \frac{dr_x}{\cos \varphi(r_x)} = \frac{4}{3} v_g F(\tau), \quad (1.17)$$

тобто координата $r_x(\tau)$ є також періодичною функцією часу: $r_x(\tau) = r_x(\tau + 2\pi n)$. Хоча інтеграли в лівих частинах рівнянь (1.14) і (1.17) не

обчислюються аналітично, ці рівняння ясно показують, що розв'язкам базової системи рівнянь (1.8) і (1.9) є функції φ і r_x , що періодично змінюються з часом. Цей факт свідчить про те, що в даному випадку (коли $v_{\perp} = v_{\parallel} = 0$) спрямований транспорт наночастинок відсутній (при наявності такого транспорту функція r_x була би неперіодичною). Підкреслимо також, що періодичність функцій φ і r_x встановлюється миттєво. Іншими словами, кут намагніченості наночастинок φ і її координата r_x змінюються з часом періодично (з безрозмірним періодом 2π) при всіх $\tau \geq 0$.

1.3.3 Динаміка наночастинок при $v_g \neq 0$, $v_{\perp} \neq 0$ і $v_{\parallel} = 0$

Цей випадок розглянуто автором в роботах [23,24]. Припускаючи, що виконується умова $v_{\perp} \neq 0$, формула (1.13) може бути узагальнена до вигляду

$$\ln \frac{\sin \varphi}{\sin \varphi_0} + \frac{3}{8} (r_x^2 - r_{x0}^2) = v_{\perp} \int_0^{\tau} \frac{\cos^2 \varphi(\tau')}{\sin \varphi(\tau')} d\tau'. \quad (1.18)$$

Так як $\varphi \in [0, \pi]$, права частина в (1.18), яку будемо позначати як $P(\tau)$, монотонно зростає з часом. В цілому, існує два режими зростання $P(\tau)$. Перший характеризується умовою $P(\tau) < \infty$, яка згідно з рівняннями (1.8) і (1.9), може виконуватися, якщо одночасно $\varphi \rightarrow \pi/2$ і $r_x \rightarrow 0$ при $\tau \rightarrow \infty$. Як видно із (1.18), цей режим може існувати лише при умові

$$\ln \sin \varphi_0 + (3/8)r_{x0}^2 + P(\infty) = 0. \quad (1.19)$$

Другий режим, який характеризується умовою $P(\tau) \rightarrow \infty$ при $\tau \rightarrow \infty$, є значно більш загальним. В цьому режимі майже всі наночастинок з $r_{x0} > 0$ рухаються вправо ($r_x \rightarrow \infty$ при $\tau \rightarrow \infty$), а майже всі наночастинок з $r_{x0} < 0$ рухаються вліво ($r_x \rightarrow -\infty$ при $\tau \rightarrow \infty$), виконуючи при цьому коливальні рухи. Таким чином, можна стверджувати, що градієнтне магнітне поле, яке періодично змінюється з часом, індукує спрямований транспорт (дрейф) наночастинок, якщо присутня перпендикулярна компонента однорідного магнітного поля ($H_{\perp} \neq 0$). На перший погляд це викликає подив, оскільки постійне магнітне поле H_{\perp} не

генерує магнітної сили. Але воно генерує додатковий обертальний момент, який впливає на поступальний рух наночастинок. Саме цей обертальний момент відповідає за появу їх спрямованого транспорту. Рис 1.2 ілюструє залежність координати наночастинки і кута намагніченості на малому часовому інтервалі.

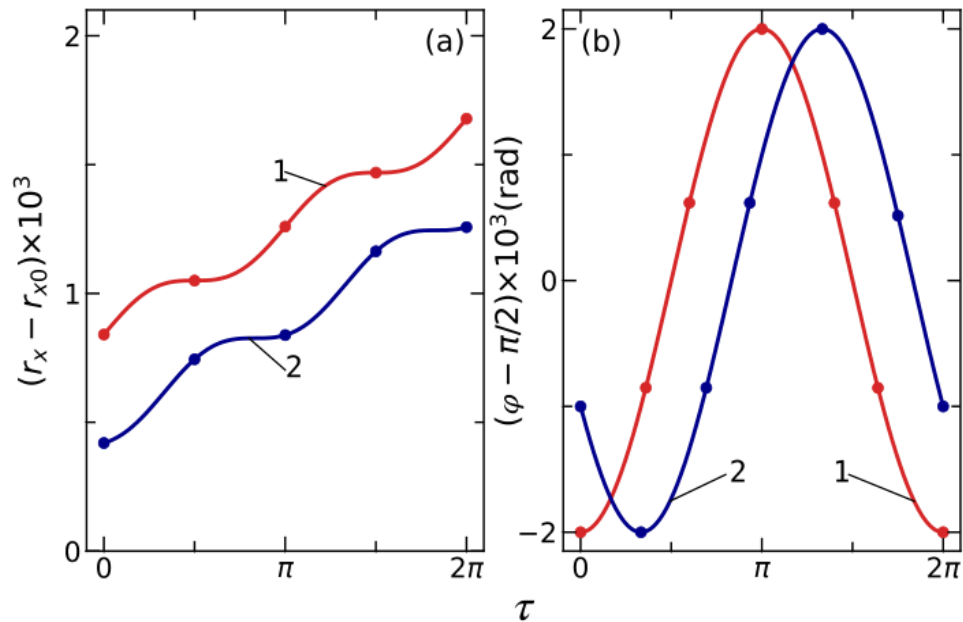


Рис. 1.2. Залежність від безрозмірного часу τ координати r_x (a) і кута намагніченості φ (b) для наночастинки в околі початку координат.

Параметри моделі для Рис. 1.2: $v_g = 0.1$, $v_{\perp} = 10^2$, $r_{x0} = 2$ і $\varphi_0 = 0.3\pi$ rad. Суцільні лінії 1 і 2 відповідають теоретичним залежностям при $\phi = \pi/2$ і $\phi = \pi/6$, відповідно. Круглі символи позначають результати, отримані шляхом чисельного розв'язання системи рівнянь (1.8) і (1.9) при $v_{\parallel} = 0$.

На Рис. 1.3 показані залежності від безрозмірного часу τ , середньої координати наночастинки \bar{r}_x , що визначається за формулою

$$\bar{r}_x = \frac{1}{2\pi} \int_{\tau}^{\tau+2\pi} r_x(\tau') d\tau', \quad (1.20)$$

екстремальних значень кута намагніченості $\varphi_{ex}(\tau)$ (φ_{\max} і φ_{\min}) на інтервалі $(\tau, \tau + 2\pi)$, а також середньої швидкості наночастинки

$$\bar{v} = d\bar{r}_x/d\tau. \quad (1.21)$$

У відповідності з теоретичними результатами, при великих τ координата \bar{r}_x зростає майже лінійно, φ_{\max} і φ_{\min} наближаються до π і 0 , відповідно, а середня швидкість наночастинки наближається до граничної величини $\bar{v}_{\infty} = \text{sgn}(r_x) 8v_g/3\pi$.

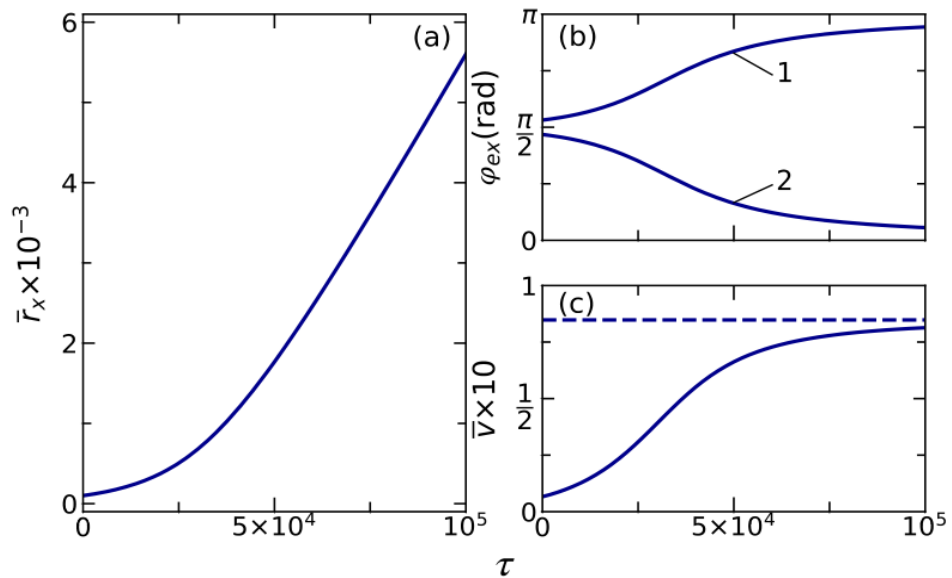


Рис. 1.3. Чисельні результати для середньої координати наночастинки (а), екстремальних значень φ_{ex} кута намагніченості (b) і середньої швидкості наночастинки (c).

Параметри моделі для Рис. 1.3: $v_g = 0.1$, $v_{\perp} = 10^2$, $r_{x0} = 10^2$, $\varphi_0 = \pi/2$ і $\phi = \pi/2$. Криві 1 і 2 відповідають функціям φ_{\max} і φ_{\min} , а пунктирна горизонтальна лінія відповідає граничній швидкості \bar{v}_{∞} .

2 МЕТОДИКА ДОСЛІДЖЕНЬ

2.1 Явний метод Рунге – Кутти 4 порядку

Методами Рунге – Кутти називають досить широкий клас чисельних методів для розв'язання задачі Коші для звичайних диференціальних рівнянь та їх систем, а також диференціальних рівнянь в часткових похідних та їх систем. Названі в честь німецьких математиків К. Рунге і М. В. Кутта, які запропонували перші методи даного класу у 1900 році.

Загальна формула для класу явних методів Рунге – Кутти має наступний вигляд:

$$y_{n+1} = y_n + h \sum_{i=1}^s b_i k_i \quad (2.1)$$

де $y = y(x)$ – шукана функція, h – крок по часу або простору, та обчислення нового значення y_{n+1} відбувається в s етапів:

$$\begin{aligned} k_1 &= f(x_n, y_n) \\ k_2 &= f(x_n + c_2 h, y_n + a_{2,1} k_1 h) \\ k_3 &= f(x_n + c_3 h, y_n + a_{3,1} k_1 h + a_{3,2} k_2 h) \\ &\dots \\ k_n &= f(x_n + c_n h, y_n + a_{s,1} k_1 h + a_{s,2} k_2 h + \dots + a_{s,s-1} k_{s-1} h) \end{aligned} \quad (2.2)$$

Для забезпечення необхідного порядку точності отриманого розв'язку p , необхідно виконання додаткової умови, пов'язаною з величиною кроку h :

$$|y(x_0 + h) - \tilde{y}(x_0 + h)| = O(h^{p+1}) \quad (2.3)$$

де $\tilde{y}(x_0 + h)$ – наближення, обчислене за методом Рунге – Кутти.

Найбільш відомим та розповсюдженим методом Рунге – Кутти є класичний явний метод Рунге – Кутти 4 порядку точності, який і буде використовуватися у даній кваліфікаційній роботі.

Наближене значення наступного кроку знаходиться наступним чином:

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \quad (2.4)$$

Безпосередньо, обчислення значень k_i для нового значення функції y_{n+1} відбувається в чотири етапи:

$$\begin{aligned} k_1 &= f(x_n, y_n) \\ k_2 &= f\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{k_1 h}{2}\right) \\ k_3 &= f\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{k_2 h}{2}\right) \\ k_4 &= f(x_n + h, y_n + k_3 h) \end{aligned} \quad (2.5)$$

2.2 Інтерполяція сплайнами

Одним із методів інтерполяції функції однієї змінної є інтерполяція сплайнами – функція, область визначення якої розбита на проміжки, на кожному зі проміжків функція задається деяким поліномом. В даній кваліфікаційній роботі використовується інтерполяція кубічним сплайном.

Розглядаємо набори $\{a = x_0 < x_1 < \dots < x_n = b\}$, $\{y_0, y_1, \dots, y_n\}$ – значення функції і сплайну відповідно. Інтерполяційний сплайн степеню m – сплайн, на кожному з інтервалів якого є функція степеню m , і на всьому відрізку $[a, b]$ має $m - 1$ неперервну похідну.

Побудова кубічного сплайну на кожному з інтервалів $[x_{i-1}, x]$, $i = \overline{1, n}$ виглядає наступним чином:

$$S(x_i) = a_i + b_i(x_i - x_{i-1}) + c_i(x_i - x_{i-1})^2 + d_i(x_i - x_{i-1})^3, \quad (2.6)$$

$$S(x_i) = a_i + b_i h + c_i h^2 + d_i h^3, \quad S(x_{i-1}) = a_i, \quad (2.7)$$

$$S'(x_i) = b_i + 2c_i h + 3d_i h^2, \quad S'(x_{i-1}) = b_i, \quad (2.8)$$

$$S''(x_i) = 2c_i + 6d_i h, \quad S''(x_{i-1}) = 2c_i, \quad (2.9)$$

де $h = x_i - x_{i-1}$.

Можна прийняти, що в крайніх точках x_0 і x_n функція приймає вигляд прямої, тобто, кривизна буде нульовою, а . Враховуючи дану умову та рівняння (2.7)-(2.9), отримуємо наступну систему рівнянь для знаходження коефіцієнтів сплайну (2.6):

$$\begin{cases} a_i = y_{i-1}, & i = \overline{1, n} \\ a_i + b_i h_i + c_i h_i^2 + d_i h_i^3 = y_i, & i = \overline{1, n} \\ b_i + 2c_i h_i + 3d_i h_i^2 = b_{i+1}, & i = \overline{1, n-1} \\ c_i + 3d_i h_i = c_{i+1}, & i = \overline{1, n-1} \\ c_1 = 0, \quad c_n + 3d_n h_n = 0 \end{cases} \quad (2.10)$$

3 РЕАЛІЗАЦІЯ КОМП'ЮТЕРНОГО ЕКСПЕРИМЕНТУ

3.1 Вибір початкових умов для розрахунків

В даному розділі розглядаються два набори початкових умов, які будуть використані у подальших розрахунках. Дані два набори підібрані таким чином, щоб дати змогу продемонструвати у повному обсязі можливу поведінку системи, що має різну поведінку при різних вхідних даних.

Також для зручності використання залежності безрозмірних характеристик v_{\perp} та v_{\parallel} від куту α , була введена нова безрозмірна характеристика для постійного однорідного магнітного поля

$$v = \frac{MH}{6\eta\Omega} = \sqrt{v_{\parallel}^2 + v_{\perp}^2}. \quad (3.1)$$

Перший набір початкових умов виглядає наступним чином:

- Характеристика постійного однорідного магнітного поля $v = 1$
- Характеристика градієнтного магнітного поля $v_g = 1$
- Початкова фаза градієнтного магнітного поля $\phi = 0$
- Початкова координата наночастинки $r_{x0} = 10$
- Початковий кут намагніченості наночастинки $\varphi_0 = \frac{\pi}{6}$

Другий набір початкових умов виглядає наступним чином:

- Характеристика постійного однорідного магнітного поля $v = 100$
- Характеристика градієнтного магнітного поля $v_g = 0,1$
- Початкова фаза градієнтного магнітного поля $\phi = \frac{\pi}{2}$
- Початкова координата наночастинки $r_{x0} = 100$
- Початковий кут намагніченості наночастинки $\varphi_0 = \frac{\pi}{2}$

Інші параметри та змінні, такі як проміжок по часу τ , крок по часу $\Delta\tau$, кут між векторами однорідного та градієнтного магнітних полів α , не задаються,

оскільки постійно змінюються, та будуть уточуватися окремо під час опису результатів та рисунків.

Надалі для при використанні під час розрахунків розглянутих двох наборів початкових умов будуть використовуватися означення «набір вхідних даних 1» та «набір вхідних даних 2», відповідно.

3.2 Отримання чисельного розв'язку системи

Для того, щоб мати змогу прослідкувати поведінку системи, було отримано її чисельний розв'язок за допомогою явного методу Рунге – Кутти 4 порядку точності (2.4). Продемонстровані нижче рисунки демонструють результати обчислення системи рівнянь (1.8) і (1.9), а також знаходження середньої швидкості наночастинки за формулою (1.21), з використанням різних початкових наборів даних, з різним кроком по часу τ та на різних часових проміжках. На даному етапі усі рішення розглядаються при $\alpha = \frac{\pi}{2}$.

3.2.1 Чисельний розв'язок системи при наборі вхідних даних 1

Для початкової демонстрації поведінки системи при даному наборі даних було отримано чисельний розв'язок на часовому проміжку $\tau = [0, 10\pi]$, що відповідає 5-ти періодам.

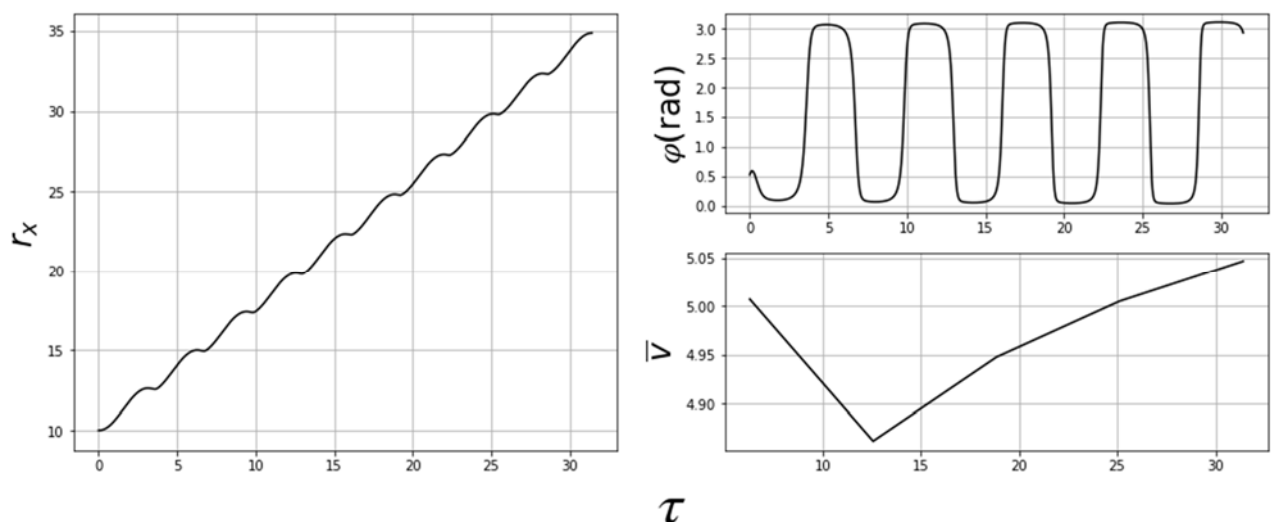


Рис. 3.1 – Координата, кут намагніченості, та вирахована середня швидкість наночастинки впродовж 5 періодів, крок по часу $\Delta\tau = \pi/1000$, набір вхідних даних 1.

Даний рисунок дає змогу побачити лише маленький проміжок часу, щоб продемонструвати характер змін координати наночастинки та кута намагніченості. Тому, для отримання більш повної картини цей проміжок необхідно збільшити в рази і дослідити отримане рішення.

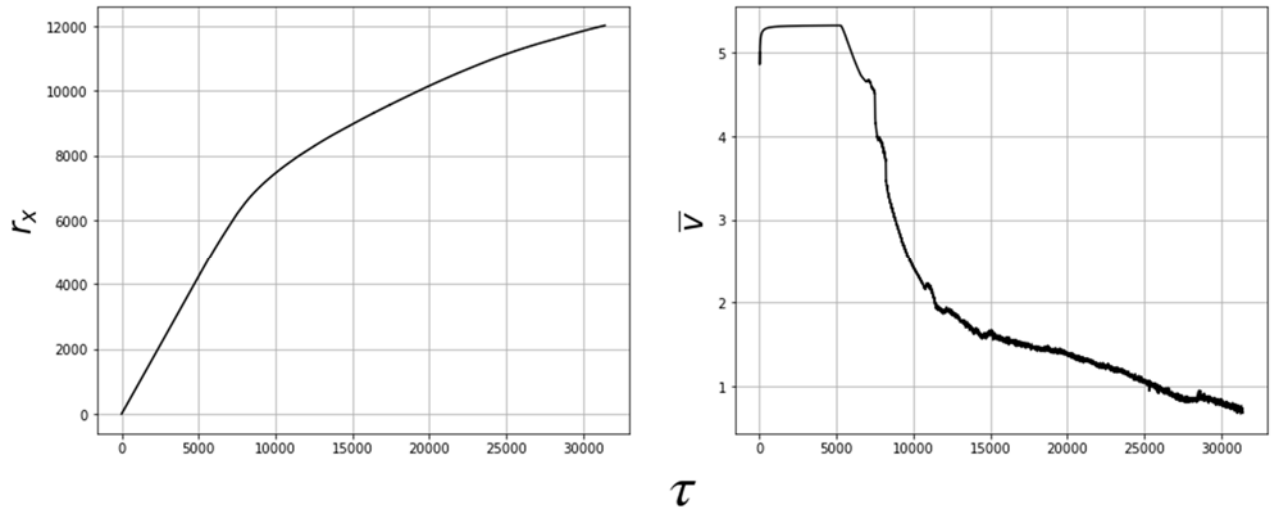


Рис. 3.2 – Координата та вирахована середня швидкість наночастинки впродовж 5000 періодів, крок по часу $\Delta\tau = \pi/5000$, набір вхідних даних 1.

На Рис. 3.2 зображено результати чисельного розв'язку системи на часовому проміжку $\tau = [0, 10000\pi]$, що відповідає 5000 періодам. Даний рисунок демонструє жорсткість системи, яка проявляється в отриманні і накопиченні похибки.

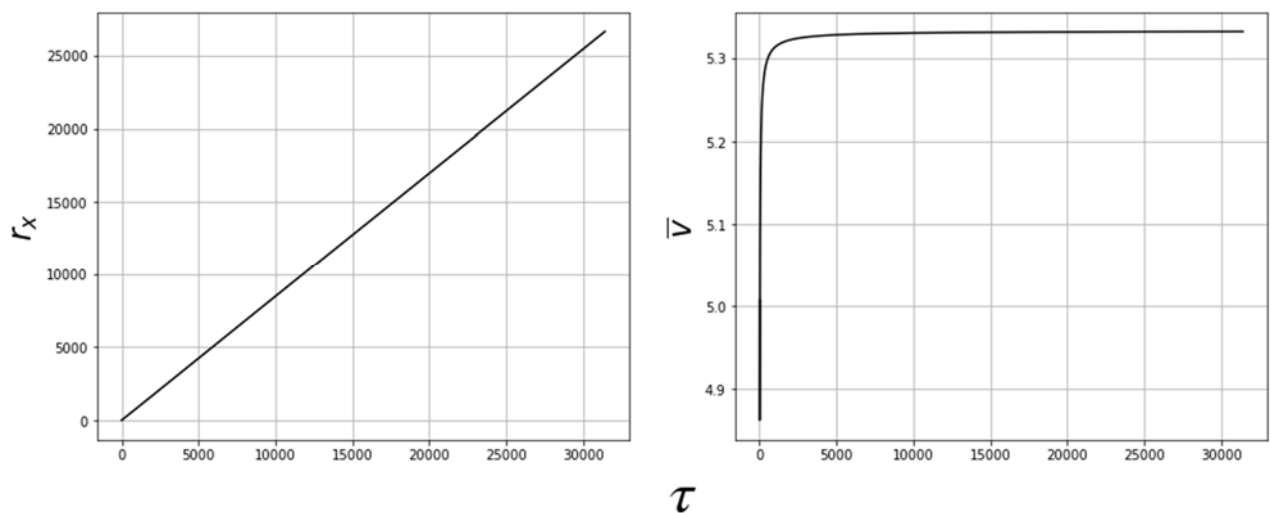


Рис. 3.3 – Координата та вирахована середня швидкість наночастинки впродовж 5000 періодів, крок по часу $\Delta\tau = \pi/30000$, набір вхідних даних 1.

З Рис. 3.3 можна бачити, що зменшення кроку по часу дозволило позбутися похибки, яка виникала із-за жорсткості системи, хоча б на розглянутому часовому проміжку.

3.2.2 Чисельний розв'язок системи при наборі вхідних даних 2

Для початкової демонстрації поведінки системи при даному наборі даних було отримано чисельний розв'язок на часовому проміжку $\tau = [0, 10\pi]$, що відповідає 5-ти періодам.

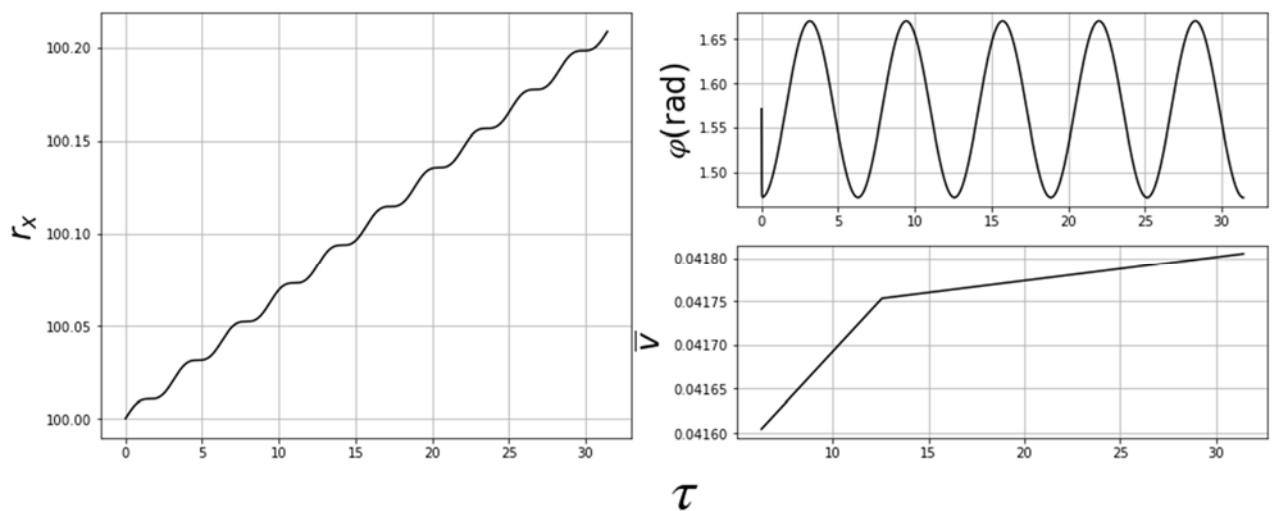


Рис. 3.4 – Координата, кут намагніченості, та вирахована середня швидкість наночастинки впродовж 5 періодів, крок по часу $\Delta_\tau = \pi/1000$, набір вхідних даних 2.

Для отримання повної картини поведінки системи було отримано чисельний розв'язок системи на часових проміжку $\tau = [0, 10000\pi]$ та $\tau = [0, 35000\pi]$, що відповідає 5000 періодам та 17500 періодам, відповідно.

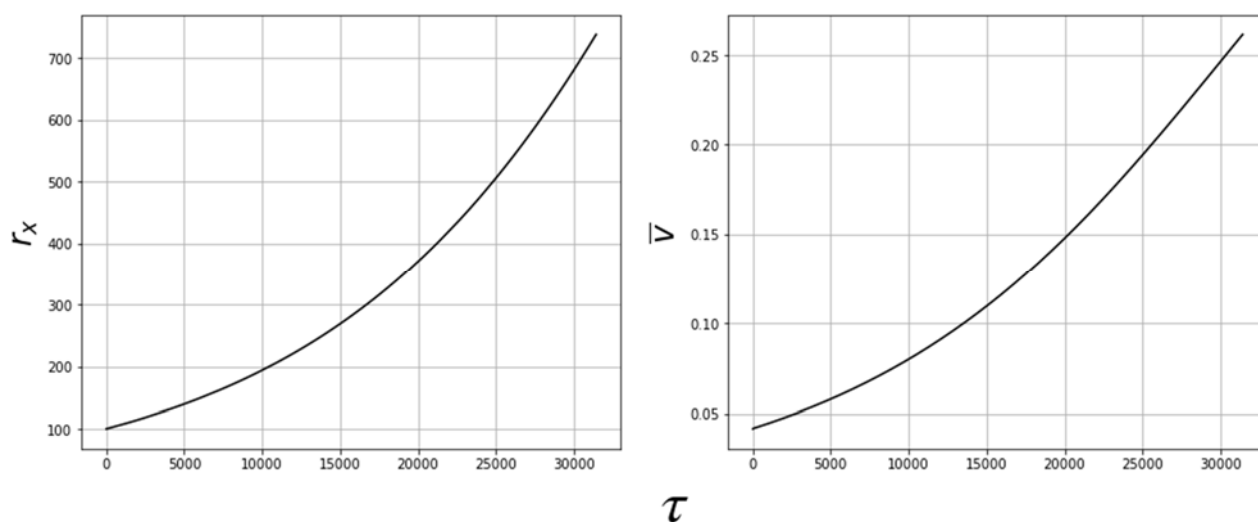


Рис. 3.5 – Координата, кут намагніченості, та вирахована середня швидкість наночастинки впродовж 5000 періодів, крок по часу $\Delta\tau = \pi/1000$, набір вхідних даних 2.

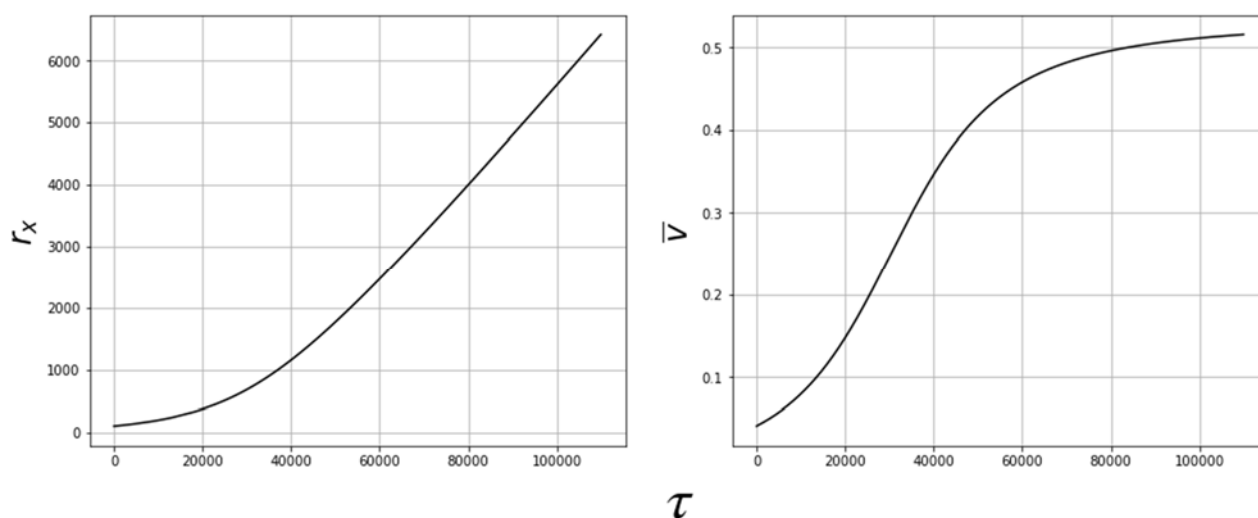


Рис. 3.6 – Координата, кут намагніченості, та вирахована середня швидкість наночастинки впродовж 17500 періодів, крок по часу $\Delta\tau = \pi/1000$, набір вхідних даних 2.

З Рис. 3.5-3.6 можна побачити, що 5000 періодів виявилось недостатньо для отримання повного представлення о змінах швидкості, тому цей інтервал було збільшено. Але при цьому даний чисельний розв'язок був отриманий з відносно великим кроком по часу, що суттєво прискорило процес розрахунків.

На малих часових проміжках поведінка наночастинки майже ідентична для обох наборів вхідних даних, що видно з Рис. 3.1 та Рис. 3.4. Наночастинка постійно змінює свій кут намагніченості на проміжку $[0, \pi]$, що в свою чергу зумовлює періодичність та нелінійний дрейф наночастинки. Також

спостерігається певна стабілізація системи на першому періоді, що виливається у неточність при обчисленні середньої швидкості.

При дослідженні набору вхідних даних 1 на великих часових проміжках, жорсткість системи призвела до отримання значної похибки у розрахунках (Рис. 3.2). Суттєве зменшення кроку по часу дозволило уникнути дану проблему на досліджуваному інтервалі, але значно зменшило швидкість отримання розв'язку (Рис. 3.3). Також на основі чисельного розв'язку можна зробити висновок, що середня швидкість наночастинки наближається до певного граничного значення, а зміна координати відбувається майже лінійно (Рис. 3.3), що можна апроксимувати лінійною функцією.

При дослідженні набору вхідних даних 2 на великих часових проміжках не було помічено впливу жорсткості системи на отриманий результат, що дозволило проводити обчислення швидко, з великим кроком по часу. Але виявилось, що часовий проміжок необхідно значно збільшити для отримання повного представлення о змінах швидкості і координати наночастинки, а сам характер змін суттєво відрізняється. Графік середньої швидкості наближається до граничного значення, але на відміну від попередніх результатів, має два вигини, замість одного. Завдяки цьому зміна координати наночастинки не відбувається за лінійним законом.

3.3 Дослідження залежності між початковою середньою швидкістю наночастинки та кутом між однорідним та градієнтним магнітними полями

Оскільки усі попередні обчислення проводилися за умови, що кут між напрямками постійного однорідного магнітного поля та градієнтного магнітного поля має значення $\alpha = \frac{\pi}{2}$. Для того, щоб отримати вигляд залежності \bar{v} від α , необхідно знайти чисельний розв'язок системи рівнянь (1.8) і (1.9) на невеликому часовому проміжку, при різних значеннях α .

Задля дотримання точності результату, під час розрахунків використовувався крок по куту $\Delta\alpha = 1^\circ$, та на кожній ітерації знаходився чисельний розв'язок на часовому проміжку $\tau = [0, 10\pi]$. Для повноти дослідження дані розрахунки проводилися окремо як для набору вхідних даних 1, так і для набору вхідних даних 2.

Швидкість називається початковою із-за того, що на великих часових проміжках її значення завжди буде наближатися до певного граничного, але для малих часових проміжків швидкість буде різною для різних значень α .

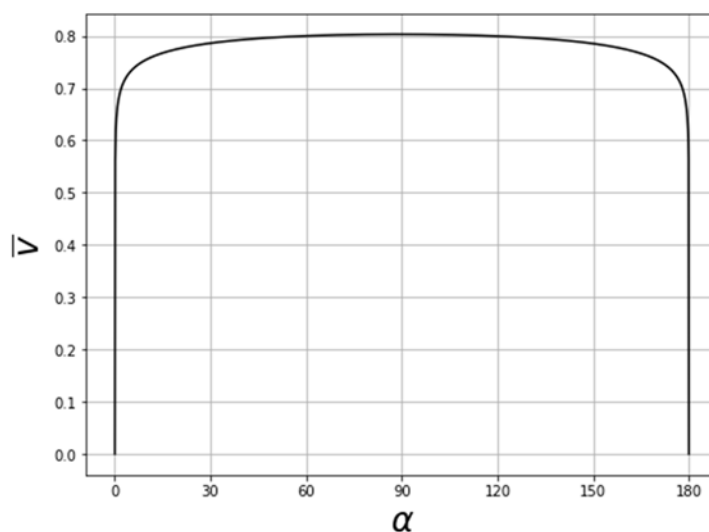


Рис. 3.7 – Вирахувана залежність між початковою середньою швидкістю наночастинки та куту між однорідним та градієнтним магнітними полями для набору вхідних даних 1.

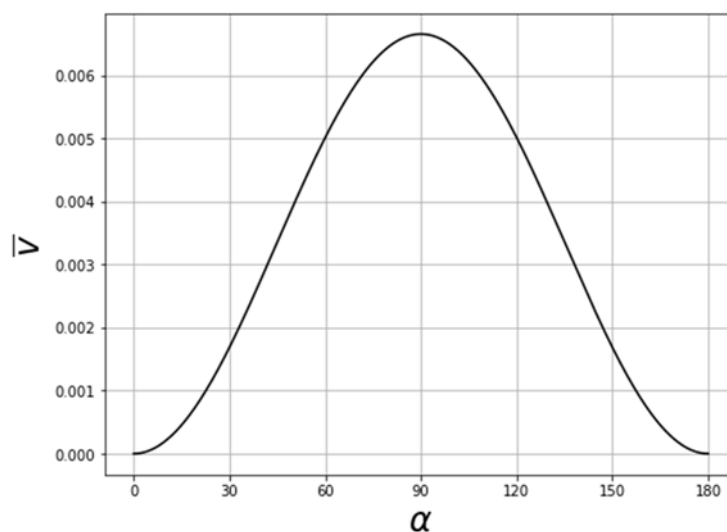


Рис. 3.8 – Вирахувана залежність між початковою середньою швидкістю наночастинки та куту між однорідним та градієнтним магнітними полями для набору вхідних даних 2.

3.4 Прогнозування руху наночастинки при зміні куту між магнітними полями

3.4.1 Чисельні розв'язки системи при наборі вхідних даних 2 і зміні куту між магнітними полями

Розглянемо декілька чисельних розв'язків для системи рівнянь (1.8) і (1.9) при використанні одного і того ж набору вхідних даних, але при різних значеннях куту між магнітними полями α .

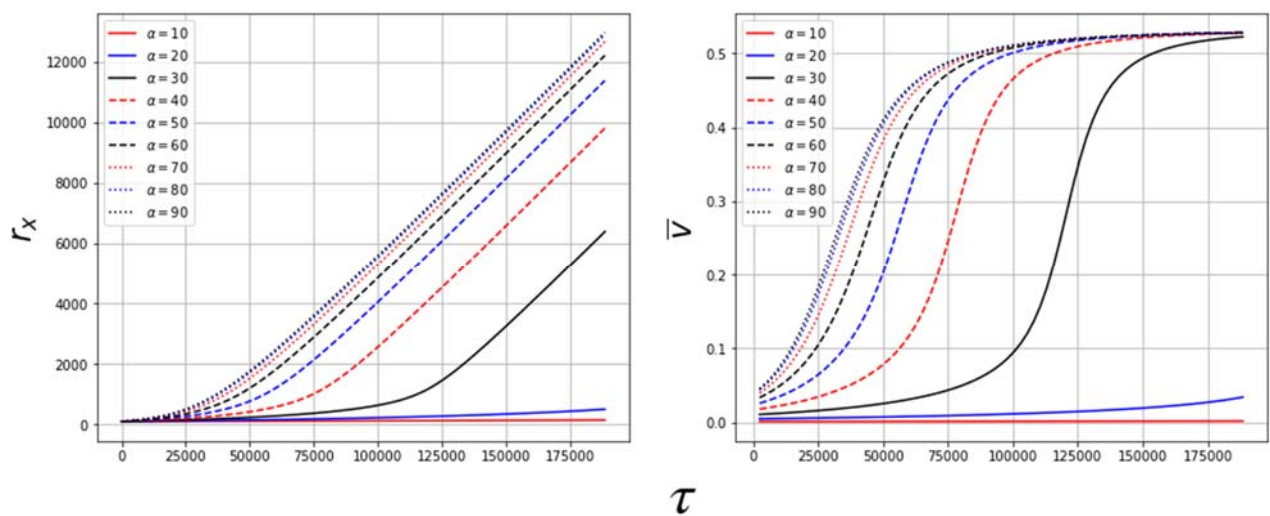


Рис. 3.9 – Координата та швидкість наночастинки при різних значеннях α (у градусах) для набору вхідних даних 2.

З Рис. 3.9. видно, що наночастинка при різних значеннях α має однаковий характер змін координати: при малих значеннях τ рух відбувається за законом, близьким до прямолінійного, згодом йде перехідний період, коли наночастинка стрімко набирає швидкість, а потім біля граничного значення швидкість падає, і наночастинка знову починає рухатися за законом, близьким до прямолінійного, зі швидкістю, близькою до граничної.

Було висунуто припущення, що якщо мати чисельний розв'язок системи рівнянь (1.8) і (1.9) при $\alpha = \frac{\pi}{2}$, і знати у який момент відбувається перехідний період, то можна спрогнозувати рух наночастинки при зміні куту між магнітними полями, не витрачаючи часу на знаходження чисельного розв'язку повторно.

3.4.2 Знаходження відношення максимальної початкової швидкості до початкової швидкості при певному значенні кута між магнітними полями

Розглянемо залежність початкової середньої швидкості наночастинки від куту між однорідним та градієнтним магнітними полями, зображену на Рис. 3.8. Очевидно, що максимальна початкова швидкість припадає на значення $\alpha = \frac{\pi}{2}$, значення швидкості при інших значеннях α розподілені симетрично відносно максимального.

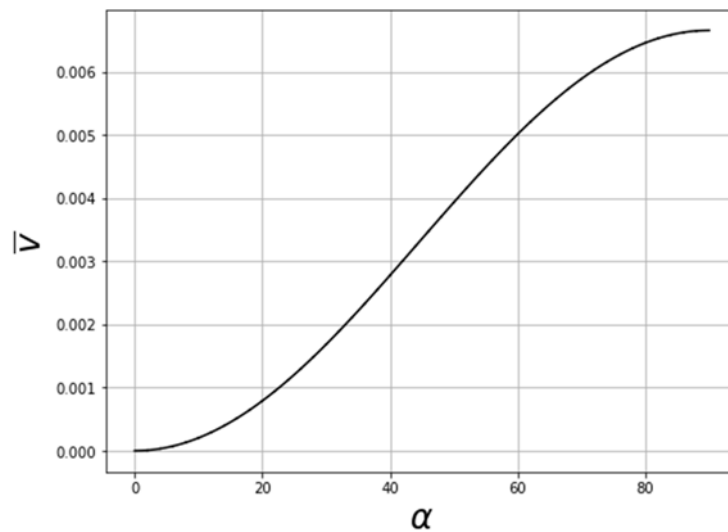


Рис. 3.10. – Залежність між середньою швидкістю наночастинки та куту між однорідним та градієнтним магнітними полями для набору вхідних даних 2 на проміжку $[0, \frac{\pi}{2}]$.

Розглянемо припущення, що дана залежність швидкості дозволить прогнозувати характер руху наночастинки для одного і того ж набору вхідних даних при зміні куту між магнітними полями. Тобто, якщо знати як відноситься швидкість при певному значенні кута до максимальної початкової швидкості (при $\alpha = \frac{\pi}{2}$), то можна за допомогою цього відношення спрогнозувати приблизний розв'язок системи рівнянь (1.8) і (1.9) використовуючи попередньо отриманий чисельний розв'язок для значення $\alpha = \frac{\pi}{2}$.

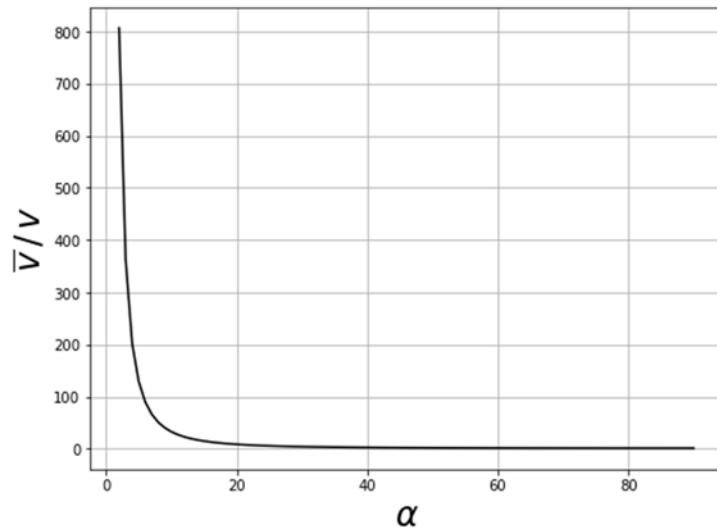


Рис. 3.11. – Відношення максимальної початкової швидкості до швидкості при певному значенні кута між магнітними полями для набору вхідних даних 2.

3.4.3 Інтерполяція прогнозованого руху частинки

Знаючи відношення з Рис. 3.11. і припускаючи, що перехідний момент руху наночастинки для різних значень α також залежить від цього відношення, можна спрогнозувати рух наночастинки при різних значеннях α .

Алгоритм дій для знаходження прогнозованого руху при деякому α_x наступний:

1. Зайти чисельний розв'язок системи при $\alpha = \frac{\pi}{2}$.
2. Розбити отриманий чисельний розв'язок зміни координати наночастинки на певну кількість відрізків та обрати з кожного відрізу точку (τ, r_x) , що лежить на ньому.
3. Знайти момент, коли починається перехідний період.
4. Для усіх обраних точок, що знаходяться середини перехідного періоду, збільшити τ відповідно до відношення з Рис 3.11. для α_x .
5. Знайти для останньої зміненої точки різницю поточного значення τ від значення τ до зміни.
6. Для усіх інших обраних точок збільшити τ на величину, що дорівнює різниці, знайденої у пункті 5.
7. Інтерполювати результат за допомогою кубічного сплайну.

В якості приклади роботи вищеописаного алгоритму розглянемо випадок руху наночастинки при $\alpha_x = \frac{\pi}{6}$, для набору вхідних даних 2. Спочатку необхідно отримати чисельний розв'язок системи при $\alpha = \frac{\pi}{2}$, та обрати певну кількість точок на ньому.

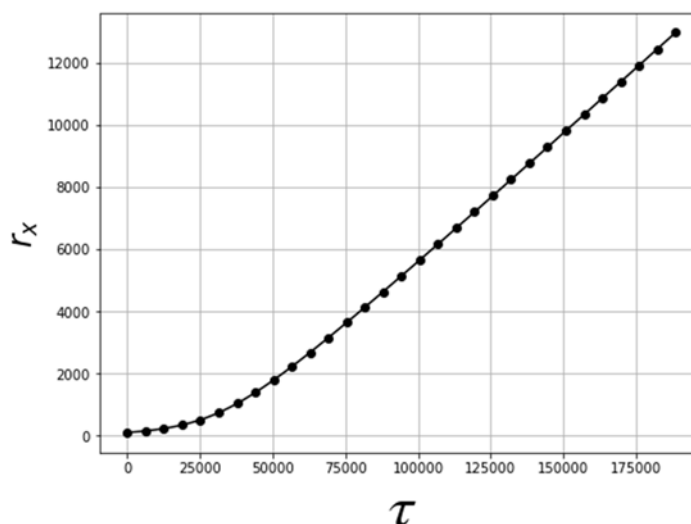


Рис. 3.12. – Вибір 30-ти точок зміни координати наночастинки з чисельного розв'язку для набору вхідних даних 2.

Було обрано 30 точок. Перші шість з них розташовані до середини перехідного періоду, тому змінюємо їх відповідно до пункту 4 з алгоритму, а інші точки змінюємо відповідно до пункту 6.

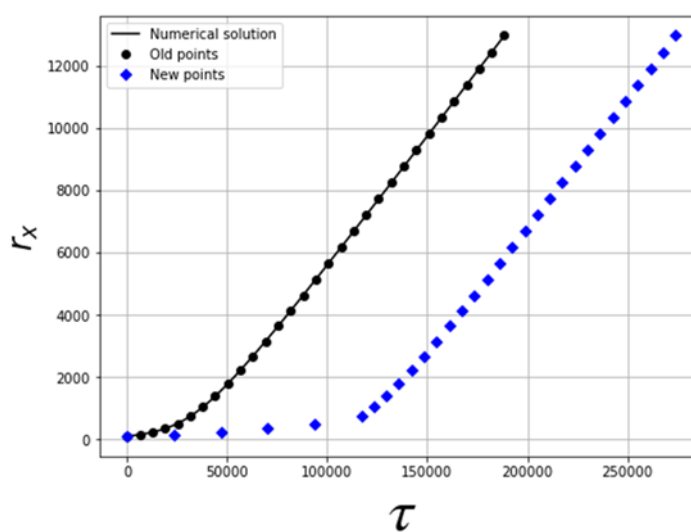


Рис. 3.13. – Зміна точок відповідно до алгоритму, та їх розташування відносно початкових значень і чисельного розв'язку.

Далі необхідно інтерполювати отримане рішення за допомогою кубічного сплайну та порівняти з актуальним чисельним розв'язком для $\alpha = \frac{\pi}{6}$, щоб перевірити точність алгоритму.

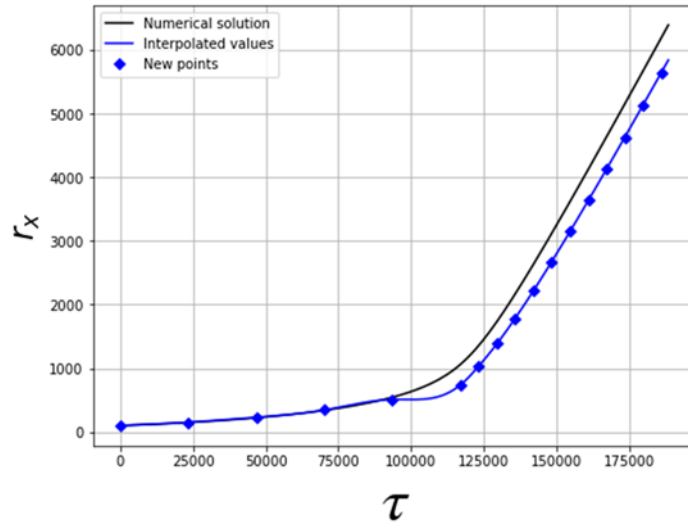


Рис. 3.14. – Порівняння чисельного розв'язку і інтерпольованого за алгоритмом.

Показані вище результати показують лише випадок, коли $\alpha_x = \frac{\pi}{6}$. Тому для отримання повної картини необхідно провести аналіз при інших значеннях α_x . Результати будуть наведені у таблиці 3.1, де α_x – кут між магнітними полями, **min** – мінімальне значення відносно чисельного розв'язку, **max** – максимальне значення, а **average** – середнє значення, що демонструє точність алгоритму.

Таблиця 3.1

Результати алгоритму при різних значеннях α_x

α_x	min	max	average
10°	97.84%	111.01%	100.84%
20°	98.35%	119.48%	105.46%
30°	67.07%	104.92%	92.22%
40°	80.26%	102.24%	95.81%
50°	88.87%	101.44%	98.24%
60°	94.70%	101.01%	99.52%
70°	98.36%	100.87%	100.08%
80°	100.00%	100.79%	100.21%

3.5 Елементи асимптотичної теорії спрямованого транспорту наночастинок

3.5.1 Динаміка наночастинок в околі початку координат

Розглянемо спочатку динаміку наночастинок в околі початку координат ($x = 0$), коли виконуються умови [25]

$$v_g \ll 1, \quad v_{\perp} \sim |v_{\parallel}| \gg 1, \quad |r_x| \ll (v_{\perp}^2 + v_{\parallel}^2)^{1/2} / v_g. \quad (3.2)$$

Згідно з результатами [12], узагальненими до випадку $v_{\parallel} \neq 0$, в цьому випадку динаміка наночастинок характеризується двома режимами, швидким та повільним. Перший відбувається при $0 < \tau < \tau_{\text{tr}} \ll 1$, а другий при $\tau \geq \tau_{\text{tr}}$, де час переходу τ_{tr} визначається за формулою

$$\tau_{\text{tr}} = \frac{\psi - \varphi_0}{(v_{\perp}^2 + v_{\parallel}^2)^{1/2} \sin(\psi - \varphi_0)} \quad (3.3)$$

з

$$\psi = \arccos \frac{v_{\parallel}}{(v_{\perp}^2 + v_{\parallel}^2)^{1/2}}. \quad (3.4)$$

Як впливає із рівнянь (1.8) і (1.9), динаміка наночастинок при $\tau \in (0, \tau_{\text{tr}})$ описується формулами

$$\begin{aligned} \varphi = \varphi_0 + [(v_{\perp}^2 + v_{\parallel}^2)^{1/2} \sin(\psi - \varphi_0) - \\ - v_g r_{x0} \sin \varphi_0 \sin \phi] \tau \end{aligned} \quad (3.5)$$

і

$$r_x = r_{x0} + (4/3)v_g \cos \varphi_0 \sin \phi \tau. \quad (3.6)$$

У випадку ж, коли $\tau \geq \tau_{\text{tr}}$, рівняння (1.8) і (1.9) у головному наближенні дають

$$\varphi = \varphi^{(0)} - r_{x0} \frac{v_g v_{\perp}}{v_{\perp}^2 + v_{\parallel}^2} [\sin(\tau + \phi) - \sin(\tau_{\text{tr}} + \phi)] \quad (3.7)$$

і

$$r_x = r_x^{(0)} + r_{x0} \frac{2v_g^2 v_{\perp}^2}{(v_{\perp}^2 + v_{\parallel}^2)^{3/2}} (\tau - \tau_{\text{tr}}). \quad (3.8)$$

Тут константи $\varphi^{(0)}$ і $r_x^{(0)}$ можуть бути знайдені із (3.5) і (3.6) як $\varphi^{(0)} = \varphi(\tau_{\text{tr}})$ і $r_x^{(0)} = r_x(\tau_{\text{tr}})$. Важливо підкреслити, що праві частини рівнянь (3.5) – (3.8) записані у наближеному вигляді (наприклад, в (3.8) ми не враховуємо малі періодичні доданки).

У подальшому нас буде цікавити поведінка r_x у дискретні моменти часу $\tau_n = 2\pi n + \tau_{\text{tr}}$, де $n = 1, 2, \dots, N$, а N – максимальне натуральне число, таке, що формула (3.8) все ще виконується. Щоб знайти формулу для $r_x(2\pi n)$, ми введемо спочатку середню швидкість наночастинки \bar{v}_n на n -му періоді градієнтного магнітного за формулою

$$\bar{v}_n = \frac{1}{2\pi} [r_x(2\pi n + \tau_{\text{tr}}) - r_x(2\pi n - 2\pi + \tau_{\text{tr}})]. \quad (3.9)$$

Так як $\tau_{\text{tr}} \ll 1$, безрозмірна координата наночастинки $r_x(2\pi n + \tau_{\text{tr}})$ може бути записана у вигляді

$$r_x(2\pi n + \tau_{\text{tr}}) = \begin{cases} r_x(2\pi n), & n = 1, 2, \dots, N, \\ r_x(\tau_{\text{tr}}) \approx r_{x0}, & n = 0. \end{cases} \quad (3.10)$$

Цей результат дозволяє нам перевизначити середню швидкість наночастинки (3.9) наступним чином:

$$\bar{v}_n = \frac{1}{2\pi} [r_x(2\pi n) - r_x(2\pi n - 2\pi)]. \quad (3.11)$$

Узагальнюючи результати [12] на випадок, коли $v_{\parallel} \neq 0$, отримуємо

$$\bar{v}_n = r_x(2\pi n - 2\pi) \frac{2v_g^2 v_{\perp}^2}{(v_{\perp}^2 + v_{\parallel}^2)^{3/2}}. \quad (3.12)$$

Нарешті, використовуючи (3.12) разом із визначенням (3.11), для координати наночастинки $r_x(2\pi n)$ знаходимо

$$r_x(2\pi n) = r_x(2\pi n - 2\pi) \left(1 + \frac{4\pi v_g^2 v_\perp^2}{3(v_\perp^2 + v_\parallel^2)^{3/2}} \right), \quad (3.13)$$

або

$$r_x(2\pi n) = r_{x0} \left(1 + \frac{4\pi v_g^2 v_\perp^2}{3(v_\perp^2 + v_\parallel^2)^{3/2}} \right)^n. \quad (3.14)$$

Таким чином, координата наночастинки зростає з числом періодів n градієнтного магнітного поля у відповідності зі степеневим законом.

3.5.2 Динаміка наночастинок далеко від початку координат

Для наночастинок, що знаходяться далеко від початку координат, умови (3.2) замінюємо на

$$v_g \ll 1, \quad v_\perp \sim |v_\parallel| \gg 1, \quad |r_x| \gtrsim (v_\perp^2 + v_\parallel^2)^{1/2} / v_g. \quad (3.15)$$

У цьому випадку, згідно з рівняннями (1.8) і (1.9), $\cos \varphi$ як функція безрозмірного часу наближається до періодичної ступінчастої функції

$$\cos \varphi = \pm \begin{cases} 1 - \left(\frac{v_\perp}{v_g r_{x0} + v_\parallel} \right)^2, & 0 < \tau < \pi - \phi, \\ -1 + \left(\frac{v_\perp}{v_g r_{x0} - v_\parallel} \right)^2, & \pi - \phi < \tau < 2\pi - \phi, \\ 1 - \left(\frac{v_\perp}{v_g r_{x0} + v_\parallel} \right)^2, & 2\pi - \phi < \tau < 2\pi. \end{cases} \quad (3.16)$$

Тут знаки ‘+’ і ‘-’ перед фігурною дужкою відповідають умовам $r_{x0} > 0$ і $r_{x0} < 0$. Для таких наночастинок їх середня швидкість на нескінченності

$$\bar{v}_\infty = \frac{2v_g}{3\pi} \lim_{N \rightarrow \infty} \int_{2\pi N - 2\pi}^{2\pi N} \cos \varphi(\tau) \sin(\tau + \phi) d\tau \quad (3.17)$$

може бути подана у вигляді

$$\bar{v}_\infty = \frac{2v_g}{3\pi} \int_0^{2\pi} \cos \varphi(\tau) \sin(\tau + \phi) d\tau. \quad (3.18)$$

Підставляючи (3.16) в (3.18) і виконуючи інтегрування при умові, що $v_g |r_{x0}| \gg |v_{\parallel}|$, отримуємо

$$\bar{v}_{\infty} = \pm \frac{8v_g}{3\pi} \left[1 - \left(\frac{v_{\perp}}{v_g r_{x0}} \right)^2 \right]. \quad (3.19)$$

Цей результат показує, що, якщо початкова координата наночастинки $|r_{x0}|$ є досить велика (або час τ є настільки великим, що $|r_x(\tau)| \gtrsim (v_{\perp}^2 + v_{\parallel}^2)^{1/2} / v_g$), тоді наночастинки рухаються майже з постійною середньою швидкістю. Це означає, що дискретна координата наночастинки $r_x(2\pi n)$ при великих n змінюється за законом

$$r_x(2\pi n) = r_x(2\pi L) + 2\pi \bar{v}_{\infty} (n - L), \quad (3.20)$$

де $n = L, L + 1, \dots$ і $|r_x(2\pi L)| \gtrsim (v_{\perp}^2 + v_{\parallel}^2)^{1/2} / v_g$.

3.5.3 Узгоджений асимптотичний аналіз

Щоб визначити координати наночастинки при довільних дискретних часах, будемо використовувати асимптотичні формули (3.14) і (3.20), що описують поведінку $r_x(2\pi n)$ при $n \leq N$ і $n \geq L$, відповідно, і будемо застосовувати методи узгодженого асимптотичного аналізу [26], які дозволяють ‘зшити’ асимптотичну поведінку $r_x(2\pi n)$ при малих і великих n . Це можна зробити у найпростіший спосіб, припускаючи, що існує такий номер N періоду градієнтного поля, на якому середня швидкість наночастинки \bar{v}_N співпадає з граничною швидкістю \bar{v}_{∞} (тобто, $N = L$). Приймаючи до уваги (3.11), (3.14) і (3.19), умову $\bar{v}_N = \bar{v}_{\infty}$, яку будемо розглядати як рівняння для визначення N , можна переписати у наступному вигляді:

$$\left(1 + \frac{4\pi v_g^2 v_{\perp}^2}{3(v_{\perp}^2 + v_{\parallel}^2)^{3/2}} \right)^{N-1} = \frac{4(v_{\perp}^2 + v_{\parallel}^2)^{3/2}}{\pi v_g v_{\perp}^2 |r_{x0}|}. \quad (3.21)$$

Оскільки другий доданок в лівій частині цього рівняння є малим у порівнянні з 1, а його права частина перевищує 1 [див. (3.15)], рівняння (3.21) дає

$$N = \frac{3(v_{\perp}^2 + v_{\parallel}^2)^{3/2}}{4\pi v_g^2 v_{\perp}^2} \ln \left(\frac{4(v_{\perp}^2 + v_{\parallel}^2)^{3/2}}{\pi v_g v_{\perp}^2 |r_{x0}|} \right). \quad (3.22)$$

Нарешті, використовуючи (3.14), (3.20) і (3.22), для координати наночастинки в дискретні моменти часу $\tau_n = 2\pi n$ знаходимо

$$r_x(\tau_n) = \begin{cases} r_{x0} \left(1 + \frac{4\pi v_g^2 v_{\perp}^2}{3(v_{\perp}^2 + v_{\parallel}^2)^{3/2}} \right)^n, & n = 1, \dots, N, \\ r_x(2\pi N) + 2\pi \bar{v}_{\infty}(n - N), & n = N + 1, \dots \end{cases} \quad (3.23)$$

Для перевірки цього аналітичного результату ми чисельно розв'язали рівняння (1.8) і (1.9). Для прикладу розглядається SmCo_5 наночастинки [27], що зважені у воді при кімнатній температурі (293 K) і характеризуються наступними параметрами: $M = 1.36 \times 10^3$ ету см^{-3} , $\eta = 1.00 \times 10^{-2}$ Р і $a = 3 \times 10^2$ нм = 3×10^{-5} см. Вважаємо також, що градієнтне магнітне поле (1.1) визначається параметрами $g = 10^2$ Ое см^{-1} , $\Omega = 4 \times 10^2$ рад с^{-1} , $\phi = \pi/2$ рад, а зовнішнє магнітне поле (1.2) має дві однакові компоненти з $H_{\parallel} = H_{\perp} = 10$ Ое. У цьому випадку безрозмірні параметри в базових рівняннях (1.8) і (1.9) дорівнюють $v_g \approx 1.67 \times 10^{-1}$ і $v_{\perp} = v_{\parallel} \approx 5.56 \times 10^2$. Вибираючи початковий кут у вигляді $\varphi_0 = \pi/3$ рад, із (3.4) і (3.3) знаходимо $\psi = \pi/4$ рад і $\tau_{\text{tr}} \approx 3.15 \times 10^{-4}$, відповідно. Нарешті, щоб вибрати часовий крок $\Delta\tau$ і часовий інтервал $(0, \tau_{\text{max}})$ для цих параметрів, ми повинні також врахувати, що базові рівняння є жорсткими. Це означає, що $\Delta\tau$ повинно бути настільки малим (у порівнянні з періодом 2π градієнтного поля), щоб розв'язок цих рівнянь залишався чисельно стабільним на всьому часовому інтервалі $(0, \tau_{\text{max}})$. З іншого боку, $\Delta\tau$ не повинно бути дуже малим, щоб час обчислень не перевищував кількох годин. Згідно з (3.22), у розглядуваному випадку

$$N \approx 1.35 \times 10^4 \ln \left(\frac{1.20 \times 10^4}{|r_{x0}|} \right), \quad (3.24)$$

тому максимальний час τ_{max} повинен задовольняти умові $\tau_{\text{max}} \gtrsim 2\pi N$.

На Рис. 3.15 показана залежність координати наночастинки $r_x(\tau_n)$ від дискретного часу $\tau_n = 2\pi n$ для параметрів моделі, введених вище. Суцільна синя лінія відповідає теоретичному результату (3.23), а круглі червоні символи позначають результати, які отримані шляхом чисельного розв'язку системи рівнянь (1.8) і (1.9). Як видно, теоретичні і чисельні результати якісно узгоджуються, особливо на відносно малих часах. Очевидно, більш точного узгодження можна очікувати, якщо урахувати декілька членів асимптотичного розкладу координати наночастинки на великих часових інтервалах.

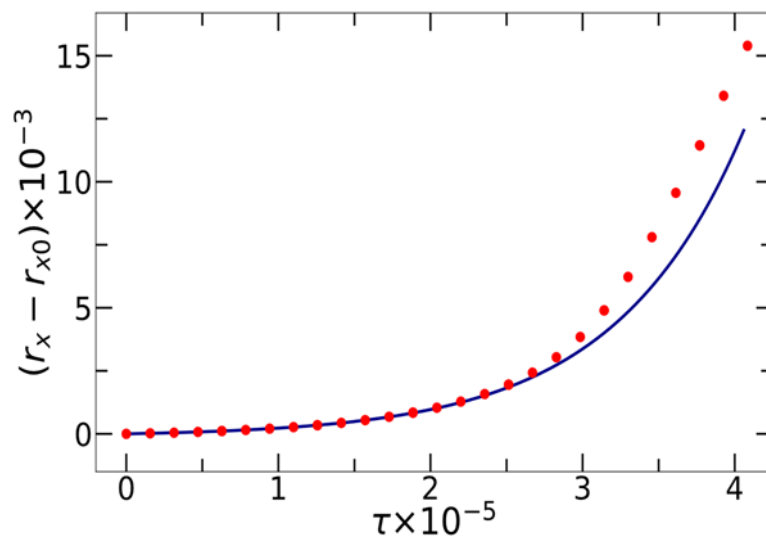


Рис. 3.15 – Залежність координати наночастинки $r_x(\tau_n)$ від дискретного часу $\tau_n = 2\pi n$ (параметри моделі наведені в тексті). Теоретичні (суцільна синя крива) і чисельні (кругові червоні символи) результати якісно узгоджуються.

ВИСНОВКИ

1. Використовуючи модель жорстких диполів, у рамках якої намагніченість однодоменної феромагнітної наночастинки вважається ‘вмороженою’ в її об’єм, отримано базову систему диференціальних рівнянь першого порядку для кута намагніченості і координати центру наночастинки, що описують її обертальний і трансляційний рухи.
2. В роботі вивчено аналітично і чисельно явище спрямованого транспорту (дрейфу) наночастинок, що з’являється у в’язкій рідині під одночасною дією періодичного у часі градієнтного і постійного у часі і просторі магнітних полів. Показано, що спрямований транспорт наночастинок виникає внаслідок динамічного зв’язку між їх обертальними та трансляційними рухами, а максимальна середня швидкість транспорту досягається при відсутності паралельної (до градієнтного поля) компоненти постійного магнітного поля.
3. Характерною особливістю базової системи диференціальних рівнянь, що використовувалися для отримання та чисельної перевірки теоретичних результатів, є їх жорсткість, тобто коли явні чисельні методи стають з часом чисельно нестабільними (рано чи пізно це виникає внаслідок дрейфу наночастинок). Тому застосовність методу Рунге – Кутти для цієї цілі завжди перевірялася емпірично на заданих часових інтервалах.
4. В роботі запропоновано найпростіший варіант асимптотичної теорії спрямованого транспорту феромагнітних наночастинок, що використовує асимптотичний розклад координати частинки на відносно малих часових інтервалах, і лінійну залежність від часу координати частинки на великих часових інтервалах. Використовуючи узгоджені асимптотичні розклади координати частинки на малих і великих часових інтервалах, визначено часову залежність координати частинки, яка якісно узгоджується з числовими результатами.
5. В роботі сформульовано та розроблено алгоритм для прогнозування змін руху наночастинки при зміні куту між постійним та градієнтним магнітними полями. Даний алгоритм передбачає використання обчисленого чисельного розв’язку системи при певному наборі вхідних даних для прогнозування поведінки частинки, якщо відбувається зміна кута між магнітними полями.

ПЕРЕЛІК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. *Nanoparticles and their Biomedical Applications* (Ed. By A.K. Shukla) (Singapore: Springer: 2020).
2. Das P., Colombo M., Prosperi D., [Colloids Surf. B 174, 42–55](#) (2019).
3. Włodarczyk A., Gorgoń S., Radoń A., Bajdak-Rusinek K., [Nanomaterials 12, 1807\(1-23\)](#) (2022).
4. *Magnetic Cell Separation* (Eds. by M. Zborowski, J.J. Chalmers) (Amsterdam: Elsevier: 2008).
5. Frenea-Robin M., Marchalot J., [Magnetochemistry 8, 11\(1-45\)](#) (2022).
6. Ulbrich K., Holá K., Šubr V., Bakandritsos A., Tuček J., Zbořil R., [Chem. Rev. 116, 5338–5431](#) (2016).
7. Kianfar E., [J. Supercond. Nov. Magn. 34, 1709–1735](#) (2021).
8. Coffey W.T., Kalmykov Yu.P., Waldron J.T., *The Langevin Equation: With Applications in Physics, Chemistry and Electrical Engineering, 2nd Edition* (Singapore: World Scientific: 2004).
9. Denisov S.I., Lyutyy T.V., Pavlyuk M.O., [J. Phys. D: Appl. Phys. 53 405001](#) (2020).
10. Denisov S.I., Pedchenko B.O., [J. Appl. Phys. 121, 043912](#) (2017).
11. Denisov S.I., Pedchenko B.O., Kvasnina O.V., Denisova E.S., [J. Magn. Magn. Mater. 443 89–95](#) (2017).
12. Denisov S.I., Lyutyy T.V., Reva V.V., Yermolenko A.S., [Phys. Rev. E 97, 032608](#) (2018).
13. Lyutyy T.V., Reva V.V., [Phys. Rev. E 97, 052611](#) (2018).
14. Ilg P., Evangelopoulos A.E.A.S., [Phys. Rev. E 97 032610](#) (2018).
15. Lyutyy T.V., Denisov S.I., Reva V.V., Bystrik Yu.S., [Phys. Rev. E 92, 042312](#) (2015).
16. Raikher Yu.L., Stepanov V.I., [Phys. Rev. E 83 021401](#) (2011).
17. Berkov D.V., Iskakova L.Yu., Zubarev A.Yu., [Phys. Rev. E 79 021407](#) (2009).
18. Rubinow S.I., Keller J.B., [J. Fluid Mech. 11, 447](#) (1961).

19. Denisov S.I., Moskalenko M.M., Lyutyi T.V., Baryba M.Yu., [J. Nano- Electron. Phys. 13, 06027](#) (2021).
20. Hairer E., Wanner G., *Solving Ordinary Differential Equations II: Stiff and Differential-Algebraic Problems, 2nd Edition* (Berlin: Springer: 1996).
21. Moskalenko M.M., Liutyi A.T., Lyutyi T.V., Denisov S.I. // Міжнародна наукова конференція молодих вчених “ФЕЕ-2022” (18-22 квітня, 2022, СумДУ, Суми). Матеріали конференції. – С. 26.
22. Denisov S.I., Lyutyi T.V., Liutyi A.T., [J. Nano- Electron. Phys. 12, 06028](#) (2020).
23. Liutyi A.T., Moskalenko M.M., Moskalenko V.O., Lyutyi T.V., Denisov S.I. // International Conference “NAP-2021” (September 05–11, 2021, Odesa, Ukraine), Abstract book, P – TPNS-A-02.
24. Denisov S.I., Lyutyi T.V., Liutyi A.T., [J. Phys. D: Appl. Phys. 55 045001](#) (2022).
25. Denisov S.I., Lyutyi T.V., Moskalenko M.M., Liutyi A.T. Asymptotic theory for directed transport of suspended ferromagnetic nanoparticles // <http://arxiv.org/abs/2212.03382>
26. Lagerstrom P.A., *Matched Asymptotic Expansions: Ideas and Techniques*, (New-York: Springer: 1988).
27. Guimarães A.P., *Principles of Nanomagnetism, 2nd Edition* (Cham: Springer: 2017).

ДОДАТОК А

Код програми, яка дозволяє отримати чисельний розв'язок системи рівнянь (1.8) та (1.9) методом Рунге – Кутти 4 порядку.

```
import matplotlib.pyplot as plt
import numpy as np
import time

def runge_kutta4(func_rx, func_phi, rx, phi, tau, h):
    k1 = h * func_rx(rx, phi, tau)
    m1 = h * func_phi(rx, phi, tau)
    k2 = h * func_rx(rx + k1 / 2, phi + m1 / 2, tau + h / 2)
    m2 = h * func_phi(rx + k1 / 2, phi + m1 / 2, tau + h / 2)
    k3 = h * func_rx(rx + k2 / 2, phi + m2 / 2, tau + h / 2)
    m3 = h * func_phi(rx + k2 / 2, phi + m2 / 2, tau + h / 2)
    k4 = h * func_rx(rx + k3, phi + m3, tau + h)
    m4 = h * func_phi(rx + k3, phi + m3, tau + h)
    Δrx = (k1 + 2 * k2 + 2 * k3 + k4) / 6
    Δphi = (m1 + 2 * m2 + 2 * m3 + m4) / 6
    return [rx + Δrx, phi + Δphi]

def decision(func_rx, func_phi, rx0, phi0, tau_interval, h):
    result = [[tau_interval[0], [rx0], [phi0], [0]]
    rx = rx0; phi = phi0; tau = tau_interval[0]
    while tau < tau_interval[1]:
        point = runge_kutta4(func_rx, func_phi, rx, phi, tau, h)
        phi = point[1]
        result[2].append(phi)
        rx = point[0]
        result[1].append(rx)
        tau += h
        result[0].append(tau)
    return result

def tic():
    global startTime_for_tictoc
    startTime_for_tictoc = time.time()

def toc():
    if 'startTime_for_tictoc' in globals():
        print("Elapsed time is " + str(time.time() - startTime_for_tictoc) + " seconds.")
    else:
        print("Toc: start time not set")

def get_velocity(array, delta_time):
    velocity = [[], []]
    velocity[1] = [(array[i] - array[i - 2 * delta_time]) for i in range(2 * delta_time, len(array) + 1, 2 * delta_time)]
    velocity[0] = [i * 2.0 * np.pi for i in range(1, len(velocity[1]) + 1)]
    return velocity
```

ДОДАТОК Б

Код програми для отримання чисельного розв'язку для наборів вхідних даних 1 і 2, та виведення результатів у вигляді графіків.

```

nu_main_1 = 1.0
nu_main_2 = 100.0
alpha = np.pi * (90.0 / 180.0)
nu1_1 = nu_main_1 * np.sin(alpha)
nu2_1 = nu_main_1 * np.cos(alpha)
nu1_2 = nu_main_2 * np.sin(alpha)
nu2_2 = nu_main_2 * np.cos(alpha)
nu_1 = 1.0
nu_2 = 0.1
f_1 = 0.0
f_2 = np.pi / 2.0
rx0_1 = 10.0
rx0_2 = 100.0
phi0_1 = np.pi / 6.0
phi0_2 = np.pi / 2.0
d_rx_1 = lambda rx, phi, tau : 4.0 / 3.0 * nu_1 * np.cos(phi) * np.sin(tau + f_1)
d_phi_1 = lambda rx, phi, tau : nu1_1 * np.cos(phi) - nu2_1 * np.sin(phi) - nu_1 * rx * np.sin(phi) * np.sin(tau + f_1)
d_rx_2 = lambda rx, phi, tau : 4.0 / 3.0 * nu_2 * np.cos(phi) * np.sin(tau + f_2)
d_phi_2 = lambda rx, phi, tau : nu1_2 * np.cos(phi) - nu2_2 * np.sin(phi) - nu_2 * rx * np.sin(phi) * np.sin(tau + f_2)
tau_interval = [0, 10.0 * np.pi]
delta_time = 1000
tau_step = np.pi / delta_time
tic()
res_1 = decision(d_rx_1, d_phi_1, rx0_1, phi0_1, tau_interval, tau_step)
toc()
v_1 = get_velocity(res_1[1], delta_time)
fig, axes = plt.subplots(2, 2, figsize = (16, 6))
ax1 = plt.subplot(1, 2, 1); ax2 = axes[0, 1]; ax3 = axes[1, 1]
fig.add_subplot(111, frameon=False)
plt.tick_params(labelcolor='none', top=False, bottom=False, left=False, right=False)
plt.xlabel('$r$', fontsize=44)
ax1.plot(res_1[0], res_1[1], color='k'); ax1.grid()
ax1.set_ylabel('$r_{x}$', fontsize=24)
ax2.plot(res_1[0], res_1[2], color='k'); ax2.grid()
ax2.set_ylabel('$\varphi(\mathrm{rad})$', fontsize=24)
ax3.plot(v_1[0], v_1[1], color='k'); ax3.grid()
ax3.set_ylabel('$\overline{v}$', fontsize=24)
plt.show()
tic()
res_2 = decision(d_rx_2, d_phi_2, rx0_2, phi0_2, tau_interval, tau_step)
toc()
v_2 = get_velocity(res_2[1], delta_time)
fig, axes = plt.subplots(2, 2, figsize = (16, 6))
ax1 = plt.subplot(1, 2, 1); ax2 = axes[0, 1]; ax3 = axes[1, 1]
fig.add_subplot(111, frameon=False)
plt.tick_params(labelcolor='none', top=False, bottom=False, left=False, right=False)
plt.xlabel('$r$', fontsize=44)
ax1.plot(res_2[0], res_2[1], color='k'); ax1.grid()
ax1.set_ylabel('$r_{x}$', fontsize=24)
ax2.plot(res_2[0], res_2[2], color='k'); ax2.grid()
ax2.set_ylabel('$\varphi(\mathrm{rad})$', fontsize=24)
ax3.plot(v_2[0], v_2[1], color='k'); ax3.grid()
ax3.set_ylabel('$\overline{v}$', fontsize=24)

```

```
plt.show()
```

ДОДАТОК В

Код програми для отримання залежності швидкості від куту між магнітними полями для наборів вхідних даних 1 і 2, та виведення результатів у вигляді графіків.

```
tau_interval = [0.0, 10.0 * np.pi]; delta_time = 1000; delta_angle = 10
velocity_1 = [], []
tic()
for i in range(0, 180 * delta_angle + 1, 1):
    alpha = np.pi * (i / 180.0 / delta_angle)
    nu1 = nu_main * np.sin(alpha); nu2 = nu_main * np.cos(alpha)
    res = decision(d_rx_1, d_phi_1, rx0_1, phi0_1, tau_interval, np.pi / delta_time)
    velocity_1[0].append(i / delta_angle)
    velocity_1[1].append((res[1][-1] - res[1][-1 - 2 * delta_time]) / 2.0 / np.pi)
toc()
```

```
fig, axes = plt.subplots(1, 1, figsize = (8, 6))
axes.plot(velocity_1[0], velocity_1[1], color = 'k')
axes.set_xticks(np.arange(0, 181, step = 30));
axes.set_xlabel('$\alpha$', fontsize=24)
axes.set_ylabel('$\overline{v}$', fontsize=24)
axes.grid()
```

```
velocity_2 = [], []
tic()
for i in range(0, 180 * delta_angle + 1, 1):
    alpha = np.pi * (i / 180.0 / delta_angle)
    nu1 = nu_main * np.sin(alpha); nu2 = nu_main * np.cos(alpha)
    res = decision(d_rx_2, d_phi_2, rx0_2, phi0_2, tau_interval, np.pi / delta_time)
    velocity_2[0].append(i / delta_angle)
    velocity_2[1].append((res[1][-1] - res[1][-1 - 2 * delta_time]) / 2.0 / np.pi)
toc()
```

```
fig, axes = plt.subplots(1, 1, figsize = (8, 6))
axes.plot(velocity_2[0], velocity_2[1], color = 'k')
axes.set_xticks(np.arange(0, 181, step = 30));
axes.set_xlabel('$\alpha$', fontsize=24)
axes.set_ylabel('$\overline{v}$', fontsize=24)
axes.grid()
```

ДОДАТОК Г

Код програми для інтерполяції функції залежності швидкості кубічним сплайном для набору вхідних даних 2.

```

X = [velocity[0][i] for i in range(0, len(velocity[0][:91]), 2)]
Y = [velocity[1][i] for i in range(0, len(velocity[1][:91]), 2)]
h = lambda i : X[i] - X[i-1]
a = lambda i : Y[i-1]
A = lambda i : h(i)
B = lambda i : h(i+1)
C = lambda i : 2 * (h(i) + h(i+1))
D = lambda i : 3 * ((Y[i+1] - Y[i]) / h(i+1) - (Y[i] - Y[i-1]) / h(i))
alpha = lambda i : 0 if i == 1 else -B(i-1) / (A(i-1) * alpha(i-1) + C(i-1))
beta = lambda i : 0 if i == 1 else (D(i-1) - A(i-1) * beta(i-1)) / (A(i-1) * alpha(i-1) + C(i-1))
x = lambda i : (D(i) - A(i) * beta(i)) / (A(i) * alpha(i) + C(i)) if i == len(X) - 2 else alpha(i+1) * x(i+1) + beta(i+1)
c = lambda i : 0 if (i == 1 or i == len(X)) else x(i-1)
b = lambda i : (Y[i] - Y[i-1]) / h(i) - h(i) * (2 * c(i) + c(i+1)) / 3
d = lambda i : (c(i+1) - c(i)) / (3 * h(i))
S = lambda x, xi, Si : Si[0] + Si[1] * (x-xi) + Si[2] * (x-xi)**2 + Si[3] * (x-xi)**3

tic()
SS = [[a(i), b(i), c(i), d(i)] for i in range(1, len(X))]
toc()
plt.figure(figsize=(8, 6))
for i in range(len(SS)):
    xx = np.linspace(X[i], X[i+1], 10)
    plt.plot(xx, S(xx, X[i], SS[i]), 'k')
plt.grid()

```

ДОДАТОК Г

Код програми для прогнозування руху наночастинки при зміні куту між магнітними полями для набору вхідних даних 2.

```
def get_velocity_for_angle(angle):
    i = 0; x = 0
    dx = X[1] - X[0]
    while x + dx < angle:
        i += 1
        x += dx
    return S(angle, X[i], SS[i])

# Numerical solutions for different angles
res = [res_10, res_20, res_30, res_40, res_50, res_60, res_70, res_80, res_90]
V = [v_10, v_20, v_30, v_40, v_50, v_60, v_70, v_80, v_90]

colors = ['r', 'b', 'k', 'r', 'b', 'k', 'r', 'b', 'k']
lines = ['-', '-', '-', '-', '-', '-', '-', '-', '-']
fig, axes = plt.subplots(1, 2, figsize = (16, 6))
ax1 = axes[0]; ax2 = axes[1]
fig.add_subplot(111, frameon=False)
plt.tick_params(labelcolor='none', top=False, bottom=False, left=False, right=False)
plt.xlabel('$\alpha$', fontsize=44)
i = 0
for tmp_res in res:
    i += 1
    ax1.plot(tmp_res[0], tmp_res[1], color=colors[i-1], label='$\alpha$'+str(i*10)+'', linestyle=lines[i-1])
ax1.legend()
ax1.grid()
ax1.set_ylabel('$r_x$', fontsize=24)
i = 0
for tmp_v in V:
    i += 1
    delta = (tmp_v[1][0] - 0) / np.pi / 100
    delta = 0
    ax2.plot([i * 400 for i in tmp_v[0]],
             [i / 400 - delta for i in tmp_v[1]], color=colors[i-1], label='$\alpha$'+str(i*10)+'', linestyle=lines[i-1])
ax2.legend()
ax2.grid()
ax2.set_ylabel('$\overline{v}$', fontsize=24)
plt.show()

plt.figure(figsize=(8, 6))
test = [get_velocity_for_angle(i) / get_velocity_for_angle(90) for i in range(90, -1, -1)]
plt.plot(range(0, 91, 1), test, 'k')

plt.figure(figsize=(8, 6))
test2 = [1 / i for i in test]
plt.plot(range(0, 91, 1), test2, 'k')
plt.xlabel('$\alpha$', fontsize=24)
plt.ylabel('$\overline{v} \backslash \wedge v$', fontsize=24)
plt.grid()

points_x = [res[8][0][i] for i in range(0, len(res[8][0]), 5)]
points_y = [res[8][1][i] for i in range(0, len(res[8][1]), 5)]
plt.figure(figsize=(8, 6))
plt.plot(res[8][0], res[8][1], 'k')
```

```
plt.plot(points_x, points_y, color='k', linestyle="", marker='o')
plt.xlabel('$\tau$', fontsize=44)
plt.ylabel('$r_x$', fontsize=24)
plt.grid()
```

```
def predicted_points(points, angle, k=6):
    result = [points[i] * test2[90 - 1 - angle] for i in range(k)]
    diff = result[k - 1] - points[k - 1]
    result += [points[i] + diff for i in range(k, len(points))]
    return result
```

```
angle = 30
pred_points_x = predicted_points(points_x, angle)
pred_points_y = points_y
plt.figure(figsize=(8, 6))
plt.plot(res[8][0], res[8][1], 'k', label='Numerical solution')
plt.plot(points_x, points_y, color='k', linestyle="", marker='o', label='Old points')
plt.plot(pred_points_x, pred_points_y, color='b', linestyle="", marker='D', label='New points')
plt.xlabel('$\tau$', fontsize=44)
plt.ylabel('$r_x$', fontsize=24)
plt.legend()
plt.grid()
```

```
angle = 30
pred_points_x = predicted_points(points_x, angle)
pred_points_y = points_y
plt.figure(figsize=(8, 6))
plt.plot(res[int(angle / 10) - 1][0], res[int(angle / 10) - 1][1], 'k')
plt.plot(pred_points_x, pred_points_y, color='k', linestyle="", marker='o')
plt.grid()
```

```
X = pred_points_x
Y = pred_points_y
tic()
SS = [[a(i), b(i), c(i), d(i)] for i in range(1, len(X))]
toc()
```

```
def get_predicted_value(tau):
    i = 0; x = 0
    dx = X[i + 1] - X[i]
    while x + dx < tau:
        i += 1
        x += dx
        dx = X[i + 1] - X[i]
    return S(tau, X[i], SS[i])
```

```
angle = 30
pred_points_x = predicted_points(points_x, angle)
pred_points_y = points_y
X = pred_points_x
Y = pred_points_y
SS = [[a(i), b(i), c(i), d(i)] for i in range(1, len(X))]
plt.figure(figsize=(8, 6))
plt.plot(res[int(angle / 10) - 1][0], res[int(angle / 10) - 1][1], 'k', label='Numerical solution')
pred_points = [get_predicted_value(i) for i in res[int(angle / 10) - 1][0]]
plt.plot(res[int(angle / 10) - 1][0], pred_points, color='b', label='Interpolated values')
plt.plot(pred_points_x[:17], pred_points_y[:17], color='b', linestyle="", marker='D', label='New points')
plt.xlabel('$\tau$', fontsize=44)
plt.ylabel('$r_x$', fontsize=24)
plt.legend()
plt.grid()
```

```
mini = 1000.0
maxi = 0.0
s = 0.0
for i, tau in enumerate(res[int(angle / 10) - 1][0]):
    actual = res[int(angle / 10) - 1][1][i]
    predicted = get_predicted_value(tau)
    diff = (predicted / actual) * 100
    s += diff
    mini = min(mini, diff)
    maxi = max(maxi, diff)
print(mini)
print(maxi)
print(s / len(res[int(angle / 10) - 1][0]))
```